

Programming Assignment 3

本次實驗目標是使用前饋式神經網路 (Feedforward Neural Network) ，在區間 $[-1, 1]$ 近似 Runge 函數：

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2},$$

以及其導數：

$$f'(x) = -\frac{50x}{(1 + 25x^2)^2}.$$

資料來源為在 $[-1, 1]$ 區間隨機取樣 2400 點，並以 5:1 的比例分割為訓練集與驗證集。

2. 模型架構與方法

- **模型結構**：輸入層 1 個神經元 \rightarrow 隱藏層兩層，每層 32 個神經元，啟用函數為 `tanh` \rightarrow 輸出層 1 個神經元（線性）。
- **損失函數**：採用 Sobolev-style loss，結合函數值與導數的 MSE：

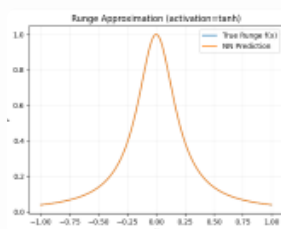
$$\mathcal{L} = \lambda_f \cdot \text{MSE}(\hat{f}, f) + \lambda_{df} \cdot \text{MSE}(\hat{f}', f'),$$

其中 $\lambda_f = 1.0$ ， $\lambda_{df} = 0.1$ 。

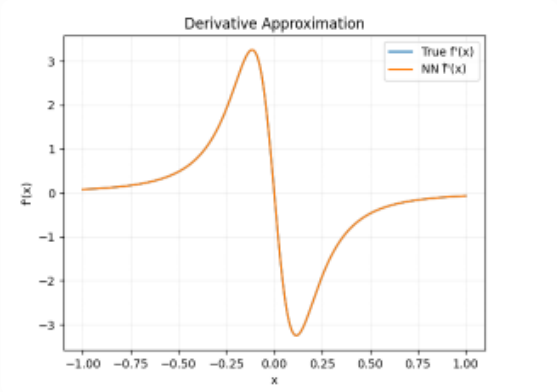
- **導數近似**：利用 PyTorch autograd 自動微分計算 $\hat{f}'(x)$ 。

3. 實驗結果

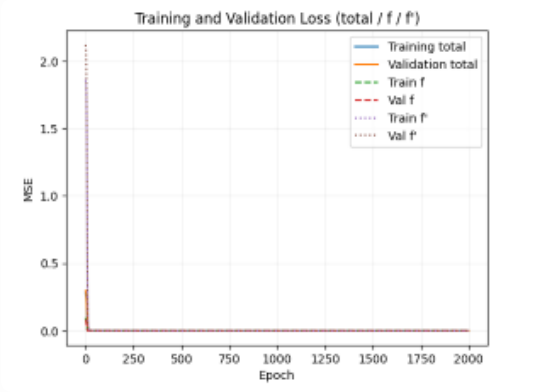
(a) 函數近似



(b) 導數近似



© Loss 曲線



(d) 誤差分析

在 1000 個均勻測試點上的表現如下：

指標	函數 f	導數 f'
測試 MSE	6.30×10^{-8}	4.98×10^{-7}
最大誤差	3.59×10^{-4}	2.57×10^{-3}

```
Epoch 1 | Train total 2.819e-01 (f 0.680e-02, f' 1.859e+00) | Val total 2.955e-01 (f 8.358e-02, f' 2.128e+00)
Epoch 200 | Train total 7.911e-06 (f 1.500e-06, f' 0.351e-05) | Val total 9.833e-06 (f 2.438e-06, f' 6.595e-05)
Epoch 400 | Train total 3.632e-06 (f 2.459e-06, f' 1.173e-05) | Val total 2.527e-06 (f 1.611e-06, f' 9.166e-06)
Epoch 600 | Train total 8.287e-07 (f 4.430e-07, f' 3.857e-06) | Val total 7.905e-07 (f 5.049e-07, f' 2.947e-06)
Epoch 800 | Train total 2.205e-07 (f 1.232e-07, f' 1.033e-06) | Val total 5.180e-07 (f 3.001e-07, f' 1.585e-06)
Epoch 1000 | Train total 4.975e-06 (f 3.309e-06, f' 1.005e-05) | Val total 1.880e-06 (f 1.182e-06, f' 6.243e-06)
Epoch 1200 | Train total 4.200e-07 (f 2.334e-07, f' 1.866e-06) | Val total 1.638e-07 (f 5.808e-08, f' 1.058e-06)
Epoch 1400 | Train total 6.570e-07 (f 4.033e-07, f' 2.537e-06) | Val total 3.698e-07 (f 9.588e-08, f' 2.730e-06)
Epoch 1600 | Train total 1.381e-07 (f 7.023e-08, f' 6.780e-07) | Val total 8.291e-08 (f 1.764e-08, f' 6.527e-07)
Epoch 1800 | Train total 1.624e-07 (f 9.164e-08, f' 7.071e-07) | Val total 4.640e-08 (f 7.847e-09, f' 3.864e-07)
Epoch 2000 | Train total 6.569e-08 (f 2.303e-08, f' 4.266e-07) | Val total 1.138e-07 (f 6.251e-09, f' 5.125e-07)

Test MSE f = 6.301153e-08 | Max |f-f'| = 3.588647e-04
Test MSE f' = 4.984917e-07 | Max |f'-f'| = 2.567291e-03
```

4. 討論

- 1. 函數近似效果佳：神經網路能準確重現 Runge 函數的曲線，MSE 在 10^{-8} 等級，與 Assignment 2 相比，精度無明顯下降。

2. **導數學習的貢獻**：將導數誤差納入損失後， $\hat{f}'(x)$ 在整個區間內平滑且準確，特別是在曲率變化大的區域。