學號：R06922048 系級： 資工所碩一 姓名：陳柏堯

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

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

* Gradient Descent with 10^(-8) learning rate
* 9 hours features
* 污染源 features: 100000 iterations
  pm2.5features: 30000 iterations
* 我將污染源 features 定義為 SO2,CO,PM10, PM2.5, NOx, NO, NO2,THC，NMHC, CH4
* 我的 Training Data 和 Validation Data 是從原始的 Training Data 去 random shuffle 然後切除 2/3 為 Training, 1/3 為 Validation

Features \ Error Score	Training	Validation	Public	Private
All Pollution features	5.8487916838	5.98204409851	7.65911	5.57930
Pm2.5	6.11281674618	6.15122550959	7.43985	5.62742

比較可以發現 validation 的 error 都會略高於 Training data 的 error。
Pollution 的含有較多 features 且包含了 Pm2.5，所以在 Training 的表現更好。
無論是 pm2.5 還是 pollution 在 public 和 private 的表現差距都有一點大，private 表現較好，我認為這是由於兩者的 testing 資料在切的時候不夠平均或不夠多，使得 Pollution 在 private 表現好，而 pm2.5 在 public 表現好。
這兩次的 submit 我都沒有做什麼 tuning，因此 private 表現較好而 public 很糟糕，我不認為是 overfitting 所導致。

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

解：

＊ 除了 hours 改成 5 小時，其他參數及 validation 都和第 1 題相同。

Features \ ErrorScore	Training	Validation	Public	Private
All Pollution features	6.53883596039	6.31968703215	8.06458	5.68668
Pm2.5	6.21701842044	6.22728179451	7.57762	5.79381

和第一題的結果比較，5 小時的 error 都比 9 小時大一些，表示 9 小時的 feature 對於 accuracy 比較有幫助。而 pollution 的 feature 在 training 的 error 比 validation 大，我認為應該是由於該 model 剛好有 fit 到所切的 validation data。

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

解：

＊參數和模型都和第一題相同設定，加上 regularization

λ=0.0001

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.85143877732	5.98225594085
Pm2.5	6.11281674618	6.15122551004

λ=0.001

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.8486805535	5.98198378618
Pm2.5	6.11281674619	6.15122550787

λ=0.01

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.83136179518	5.97565268913
Pm2.5	6.11281674621	6.15122548614

λ=0.1

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.83182971205	5.97801002921
Pm2.5	6.11281674646	6.15122526882

λ=1

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.83162216839	5.97756707025
Pm2.5	6.1128167497	6.15122309644

λ=10

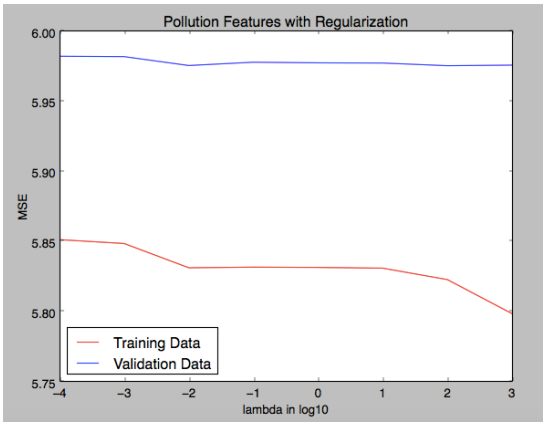
Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.83109258332	5.97741279883
Pm2.5	6.11281685617	6.15120145481

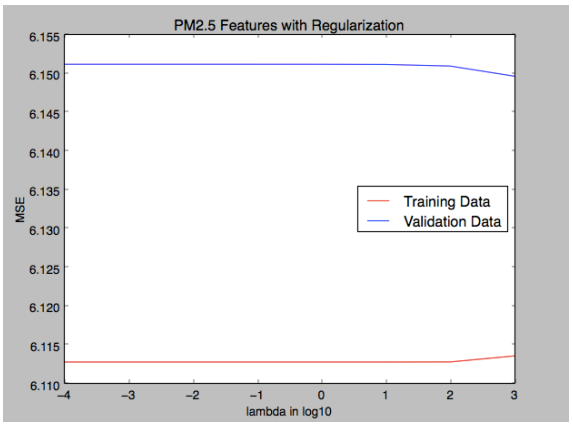
λ=100

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.82294653669	5.97552785426
Pm2.5	6.11282528073	6.1509932039

λ=1000

Features \ ErrorScore	Training	Validation
All Pollution features	5.79867939479	5.97593640325
Pm2.5	6.11360235617	6.1496826974





可以發現，在 lambda 0.0001~1 之間的 Regularization，performance 都沒有明顯的改變，我認為這是因為 learning rate 很小，乘上去之後對原本的 model 沒有貢獻太多的變化。因此我將 lambda 放大到 1000，發現 training data 的 error 有所改變，而 validation 的 error 還是有輕微地下降，表示 regularization 是有一定幫助的。

在 PM2.5 中，regularization 的效果比較明顯，而在 pollution 中比較不明顯，我認為這是因為 pollution 的參數比較多，而 100000 的 iteration 之後仍然沒有到完全的收斂，因此 regularization 過程中反而增加了 validation 一些誤差。

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)為一存量 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) $(X^TX)X^Ty$

(b) $(X^TX)^{-0}X^Ty$

(c) $(X^TX)^{-1}X^Ty$

(d) $(X^TX)^{-2}X^Ty$

解：

如下:

$$Loss = \sum_{n=1}^{N} (y^n - x^n \cdot w)^2$$

只考虑 w_0 时: $\frac{\partial Loss}{w_0} = 2 * \sum [(y^n - x^n \cdot w_0) * x^n]$

Let $\frac{\partial Loss}{w_0} = 0 \Rightarrow 2 * \sum [(y^n - x^n * w_0) .* x^n] = 0$

$\Rightarrow \sum [y^n .* x^n] - \sum (x^n * w_0 .* x^n) = 0$

$\Rightarrow X^T * Y - X^T * X * W_0 = 0 \Rightarrow w_0 = (X^T X)^{-1} X^T Y$

So $\frac{\partial Loss}{W} = 0 \Rightarrow 2 * X^T (Y - XW) = 0$

$\Rightarrow 2 * X^T X W = 2 X^T Y$

如果 $X^T X$ 可逆 $\Rightarrow W = (X^T X)^{-1} X^T Y$ 选 (C)