學號：B03b02014 系級：生技三 姓名：張皓鈞

1. 請簡明扼要地闡述你如何抽取模型的輸入特徵 (feature)

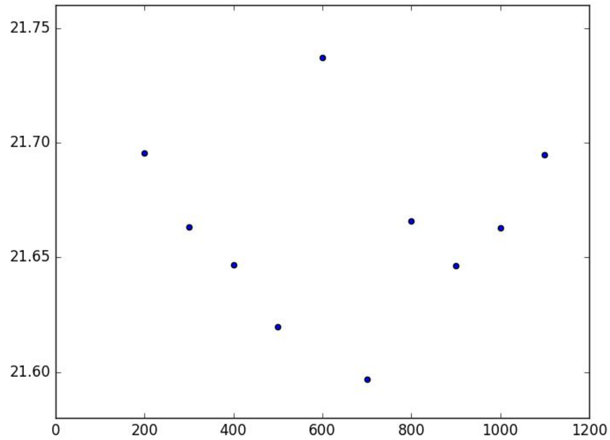
答：

將每個月連續20天拉成一個時間軸，每9小時取一組(18測項x9小時)的特徵，再將全部時間點的各測項進行標準化（減掉平均再除以標準差）。

2.請作圖比較不同訓練資料量對於PM2.5預測準確率的影響

答：

此圖為stochastic gradient descent中iteration的數目從200, 300, …, 1100對validation data的損失作比較，validation data為隨機從training data取樣1/10，其餘參數皆和hw1.sh中所執行之模型相同。



從中我們可以發現validation loss呈現小幅度振盪的情況，而選取validation loss最小的iteration數(iter=700)的模型來測試測資，發現在public score上為5.89435，比之前（hw1.sh）的模型分數稍微高（5.89229）。

3. 請比較不同複雜度的模型對於PM2.5預測準確率的影響

答：

我們以兩種不同複雜度的模型進行比較討論，這兩種分別為一次和二次的回歸模型，模型如下：

$$Y = WX$$

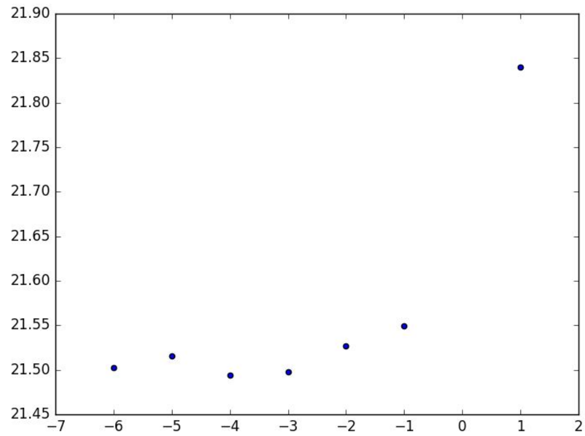
$$Y = W_1X + W_2X^2$$

其中Y為預測值，X為輸入特徵, W, W_1, W_2, W_3為模型參數。

一次的回歸模型使用1.的方式抽取feature，以stochastic gradient descent加上RMSprop的gradient descent方法，在kaggle public score上為5.89229。

而二次的回歸模型我們將二次的特徵和一次的特徵各自進行標準化（standardization), 其餘參數皆和一次回歸模型相同，在kaggle public score上為6.22982。

4. 請討論正規化(regularization)對於PM2.5預測準確率的影響
答：
在此加入正規化後的損失函數為 $L = (y^n - w \cdot x^n)^2 + \lambda\, w^2$， 此圖為正規化係數（λ)從 $10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-1}, 1, 10$，分別對隨機240筆validation data的損失作比較，x軸為log10(λ)，其餘參數皆和hw1.sh中所執行之模型相同。



從中我們可以發現正規化係數在等於10的時候有較大的validation loss，而選取validation loss最小的正規化係數($\lambda=10^{-4}$)的模型來測試測資，發現在public score上為5.95876，比加入正規化之前（hw1.sh）的模型分數還高（5.89229）。

5. 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 $\sum_{n=1}^{N} (y^n - w \cdot x^n)^2$ 。若將所有訓練資料的特徵值以矩陣 $X = [x^1\ x^2\ \ldots\ x^N]$ 表示，所有訓練資料的標註以向量 $y = [y^1\ y^2\ \ldots\ y^N]^T$表示，請以 X 和 y 表示可以最小化損失函數的向量 w 。
答：
令 $L = \sum_{n=1}^{N} (y^n - w \cdot x^n)^2$，右式展開後L為：

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

將總和的式子以矩陣表示，則L會變成：

$$L = y^T y - 2(XW)^T y + W^T X^T X W$$

將L對模型參數w做偏微分，令其為0求最小值：

$$\frac{\partial L}{\partial W} = 2X^T X W - 2X^T y = 0$$

由上式得知，可以最小化L的向量w為：

$$W = (X^T X)^{-1} X^T y$$