

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

A.全部 9 小時內的污染源 feature 的一次項，RMSE：5.62719+7.44013=13.06732

B.全部 9 小時內 PM2.5 的一次項，RMSE：5.53562+7.46237=12.99799

兩種情況相較看起來，全部 data：bias 較高、variance 較低

PM2.5：bias 較低、variance 較高

所以可以推測 9 個小時 PM2.5 資料是比較好的 model，但是因為 training data 比較少，所以要有 overfitting 的狀況，如果想要再改善此結果可以用 regulation。

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

A.全部 5 小時內的污染源 feature 的一次項，RMSE：5.44092+7.65925=13.10017

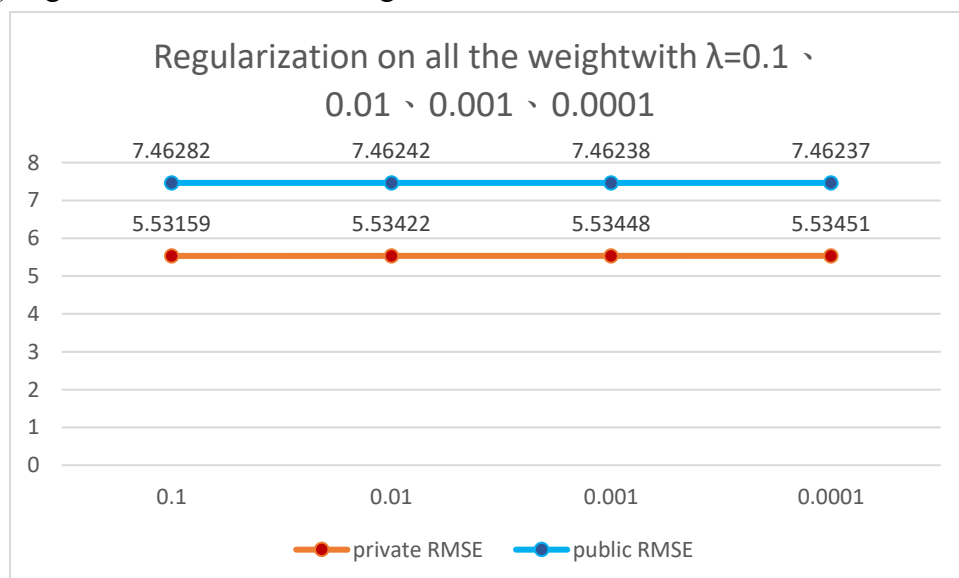
B.全部 5 小時內 PM2.5 的一次項，RMSE：5.79187+7.57904=13.37091

兩種情況相較看起來，全部 data：bias 較低、variance 較高

PM2.5：bias 較高、variance 較低

所以可以推測 5 個小時全部 data 是比較好的 model，但是因為 training data 比較少，所以要有 overfitting 的狀況，如果想要再改善此結果可以用 regulation。

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



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 $\sum_{n=1}^N (x^n - x^n \cdot w)^2$ 。若將所有訓練資料的特徵值以矩陣 $X = [x^1 \ x^2 \ \dots \ x^N]^T$ 表示，所有訓練資料的標註以向量 $y = [y^1 \ y^2 \ \dots \ y^N]^T$ 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 $X^T X$ 為 invertible)

- (a) $(X^T X)X^T y$
- (b) $(X^T X)^{-1} X^T y$
- (c) $(X^T X)^{-1} X^T y$
- (d) $(X^T X)^{-2} X^T y$

假設每筆訓練資料的 feature 數為 k

假設 d 是一個 $\text{shape} = (N, 1)$ 矩陣，

假設 u 是一個 $\text{shape} = (k, 1)$ 矩陣 $\rightarrow y^n = x^n \times u + d$

以 $x^n_{c=i}$ 表示 x^n 第 i 個 column，

Suppose $x^n_{c=j} \cdot d \neq 0$ ，exist u', d'

$$s.t. x^n \cdot d' = 0, d = x^n \times u' + d'$$

because $x^n \cdot d' = 0$

$$\rightarrow \text{norm}(d) = \text{norm}(x^n \times u') + \text{norm}(d')$$

$$\rightarrow \text{norm}(d) > \text{norm}(d') \rightarrow d \text{ is not minimum}$$

$\rightarrow \text{contradiction}$

$$\forall i \ x^n_{c=j} \cdot d = 0$$

$$x^{nT}(y^n) = x^{nT}(x^n \times u + d) = x^{nT} \times x^n \times u + x^{nT} \times d$$

$$\text{because } \forall i \ x^n_{c=j} \cdot d = 0 \rightarrow x^{nT} \times d = 0$$

$$\rightarrow x^{nT}(y^n) = x^{nT} \times x^n \times u$$

$$\rightarrow u = (x^{nT} \times x^n)^{-1} \times x^{nT}(y^n) \text{ 即為所求}$$

Answer is C