KHÔNG GIAN VÉC TƠ

Nguyễn Mạnh Hùng

AI Academy Vietnam

September, 2021

Nội dung

Không gian véc tơ (vector space)

Định nghĩa

Một không gian véc tơ thực $V = (\mathcal{V}, +, \cdot)$ là một tập khác rỗng $\mathcal{V}$ với hai phép toán:

$$\begin{aligned} + &: \mathcal{V} \times \mathcal{V} \to \mathcal{V} \\ \cdot &: \mathbb{R} \times \mathcal{V} \to \mathcal{V} \end{aligned}$$

thỏa mãn

1. $(\mathcal{V}, +)$ là một nhóm Abel
2. Tính chất phân phối:
   a. $\forall \lambda \in \mathbb{R}$, $\mathrm{x}, \mathrm{y} \in \mathcal{V}$: $\lambda(\mathrm{x} + \mathrm{y}) = \lambda \mathrm{x} + \lambda \mathrm{y}$
   b. $\forall \lambda, \beta \in \mathbb{R}$, $\mathrm{x} \in \mathcal{V}$: $(\lambda + \beta)\mathrm{x} = \lambda \mathrm{x} + \beta \mathrm{x}$
3. Tính chất kết hợp: $\forall \lambda, \beta \in \mathbb{R}$, $\mathrm{x} \in \mathcal{V}$: $\lambda(\beta \mathrm{x}) = (\lambda\beta)\mathrm{x}$
4. Tính bất biến của phép nhân với đơn vị: $\mathrm{x} \in \mathcal{V}$: $1.\mathrm{x} = \mathrm{x}$

Phần tử $\mathrm{x} \in V$ được gọi là véc tơ.

Không gian véc tơ

Ví dụ:

- $\mathcal{V} = \mathbb{R}^n$ $(n \in \mathbb{N})$ là một không gian véc tơ với các phép toán được định nghĩa như sau:
  - Phép cộng: $\mathrm{x} + \mathrm{y} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) + (y_1, y_2, \ldots, y_n) = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \ldots, x_n + y_n)$ với mọi $\mathrm{x}, \mathrm{y} \in \mathbb{R}^n$
  - Phép nhân với số vô hướng: $\lambda \mathrm{x} = \lambda(x_1, x_2, \ldots, x_n) = (\lambda x_1, \lambda x_2, \ldots, \lambda x_n)$ với mọi $\lambda \in \mathbb{R}$, $\mathrm{x} \in \mathbb{R}^n$
- $\mathcal{V} = \mathbb{R}^{m \times n}$ $(m, n \in \mathbb{N})$ là một không gian véc tơ với
  - Phép cộng: $\mathrm{A} + \mathrm{B} = \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & \cdots & a_{1n} + b_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} + b_{m1} & \cdots & a_{mn} + b_{mn} \end{pmatrix}$ với mọi $\mathrm{A}, \mathrm{B} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
  - Phép nhân với số vô hướng: $\lambda \mathrm{A} = \begin{pmatrix} \lambda a_{11} & \cdots & \lambda a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \lambda a_{m1} & \cdots & \lambda a_{mn} \end{pmatrix}$ với mọi $\lambda \in \mathbb{R}$, $\mathrm{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$

Không gian véc tơ

- $\mathcal{V} = \mathbb{P}_n,\ n \in \mathbb{N}$ là không gian véc tơ gồm các đa thức có bậc không vượt quá n có dạng:

$$\mathrm{p}(x) = a_0 + a_1\,x + a_2\,x^2 + \cdots + a_n\,x^n$$

với các hệ số a_i và biến x là các số thực. Các phép toán trên $\mathbb{P}_n$ được định nghĩa như sau:

  - Phép cộng: với mọi $\mathrm{q} = b_0 + b_1\,x + b_2\,x^2 + \cdots + b_n\,x^n \in \mathbb{P}_n$

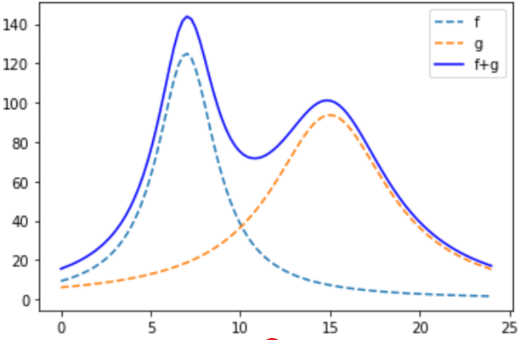
$$(\mathrm{p} + \mathrm{q})(x) = (a_0 + b_0) + (a_1 + b_1)x + \ldots (a_n + b_n)x^n$$

  - Phép nhân với số vô hướng: với mọi $\lambda \in \mathbb{R}$

$$(\lambda \mathrm{p})(x) = (\lambda\,a_0) + (\lambda\,a_1)x + \cdots + (\lambda\,a_n)x^n$$

Không gian véc tơ

- $\mathcal{V}$ là không gian véc tơ các hàm số thực xác định trên một tập $\mathbb{D}$ với các phép toán được định nghĩa như sau:
  - Phép cộng: $(f+g)(x) = f(x) + g(x)$ với mọi $f,\ g \in \mathbb{V}$
  - Phép nhân với số vô hướng: $(\lambda f)(x) = \lambda f(x)$ với mọi $\lambda \in \mathbb{R}$



Tổ hợp tuyến tính (linear combination)

Định nghĩa

Cho một không gian véc tơ V và một số hữu hạn các véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k \in V$. Khi đó, mọi $\mathrm{v} \in V$ có dạng

$$\mathrm{v} = \lambda_1 \mathrm{x}_1 + \cdots + \lambda_k \mathrm{x}_k \in V$$

với $\lambda_1, \ldots, \lambda_k \in \mathbb{R}$ là một tổ hợp tuyến tính của các véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k$.

Ví dụ: Cho các véc tơ $\mathrm{v}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}$, $\mathrm{v}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\mathrm{v}_3 = \begin{pmatrix} 6 \\ 16 \\ -5 \end{pmatrix}$. Ta thấy $\mathrm{v}_3 = 5\mathrm{v}_1 + 3\mathrm{v}_2$. Do đó v_3 là một tổ hợp tuyến tính của v_1, v_2.

Sự độc lập và phụ thuộc tuyến tính

Định nghĩa (linear independence/dependence)

Cho một không gian véc tơ V và $k \in \mathbb{N}$ véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k \in V$. Nếu tồn tại một tổ hợp tuyến tính không tầm thường của 0, sao cho

$$0 = \lambda_1 \mathrm{x}_1 + \cdots + \lambda_k \mathrm{x}_k$$

với ít nhất một số $\lambda_i \neq 0$, thì các véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k$ là *phụ thuộc tuyến tính*. Nếu chỉ tồn tại tổ hợp tuyến tính tầm thường của véc tơ 0, tức là $\lambda_1 = \cdots = \lambda_k = 0$ thì các véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k$ là *độc lập tuyến tính*.

Chú ý: Véc tơ 0 luôn có thể được viết dưới dạng tổ hợp tuyến tính của k véc tơ $\mathrm{x}_1, \ldots, \mathrm{x}_k$ bởi vì $0 = \sum_{i=1}^{k} 0\,\mathrm{x}_i$ luôn đúng.

Sự độc lập và phụ thuộc tuyến tính

Ví dụ: Hệ tọa độ địa lý có thể được xem như một không gian véc tơ 2 chiều. Do đó, để xác định vị trí một điểm, ta chỉ cần tối đa 2 véc tơ.

Sự độc lập và phụ thuộc tuyến tính

Ví dụ: Cho các véc tơ trong $\mathbb{R}^4$ với: $v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad v_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad v_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$

Để kiểm tra hệ véc tơ là độc lập hay phụ thuộc tuyến tính, ta xét

$$\lambda_1 v_1 + \lambda_2 v_2 + \lambda_3 v_3 = 0$$

Đây là một hệ phương trình tuyến tính thuần nhất, ma trận hệ số có các cột là các véc tơ v_1, v_2, v_3. Đưa ma trận hệ số về dạng bậc thang:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 2 & 1 & -2 \\ -3 & 0 & 1 \\ 4 & 2 & 1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathrm{rank}(A) = 3$$

Do đó $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$ và các véc tơ v_1, v_2, v_3 độc lập tuyến tính.

Hệ sinh và cơ sở

Hệ sinh (generating set)

Cho một không gian véc tơ $V = (\mathcal{V}, +, \cdot)$ và một tập véc tơ $\mathcal{A} = \{x_1, \ldots, x_k\} \subset \mathcal{V}$.

- Nếu mọi véc tơ $v \in \mathcal{V}$ đều được biểu diễn dưới dạng tổ hợp tuyến tính của $x_1, \ldots, x_k$, thì $\mathcal{A}$ được gọi là *hệ sinh* của V.
- Tập tất cả các tổ hợp tuyến tính của các véc tơ trong $\mathcal{A}$ được gọi là *không gian sinh bởi* $\mathcal{A}$, kí hiệu $\mathrm{span}[\mathcal{A}]$. Nếu $\mathcal{A}$ sinh ra V thì ta viết $V = \mathrm{span}[\mathcal{A}]$ hoặc $V = \mathrm{span}[x_1, \ldots, x_k]$.

Hệ sinh và cơ sở

Cơ sở (basis)

Cho một không gian véc tơ $V = (\mathcal{V}, +, \cdot)$ và $\mathcal{B} \subset \mathcal{V}$. Tập véc tơ $\mathcal{B}$ được gọi là một *cơ sở* của không gian véc tơ $\mathcal{V}$ nếu:

(i) $\mathcal{B}$ là một tập độc lập tuyến tính,

(ii) $\mathcal{B}$ là một hệ sinh của V.

Hệ sinh và cơ sở

Các mệnh đề tương đương

Cho một không gian véc tơ $V = (\mathcal{V}, +, \cdot)$, $\mathcal{B} \subset \mathcal{V}$ và $\mathcal{B} \neq \emptyset$. Khi đó, các mệnh đề sau là tương đương

- $\mathcal{B}$ là một cơ sở của V.
- $\mathcal{B}$ là một tập sinh tối thiểu của V.
- $\mathcal{B}$ là một tập độc lập tuyến tính tối đa, tức là thêm bất cứ véc tơ nào vào $\mathcal{B}$ cũng tạo thành tập phụ thuộc tuyến tính.
- Mọi $\mathrm{x} \in V$ đều có biểu diễn tuyến tính theo $\mathcal{B}$ và biểu diễn là duy nhất.

Hệ sinh và cơ sở

Ví dụ:

- Trong $\mathbb{R}^3$, *cơ sở chính tắc* có dạng: $\mathcal{B} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$.
- Các cơ sở khác của $\mathbb{R}^3$:

$$\mathcal{B}_1 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad \mathcal{B}_2 = \left\{ \begin{pmatrix} 0.5 \\ 0.8 \\ 0.4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1.8 \\ 0.3 \\ 0.3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -2.2 \\ -1.3 \\ 3.5 \end{pmatrix} \right\}$$

- Tập $\mathcal{A} = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \\ -4 \end{pmatrix} \right\}$ độc lập tuyến tính, nhưng không phải hệ sinh của $\mathbb{R}^4$, do đó không phải cơ sở của $\mathbb{R}^4$.

Hệ sinh và cơ sở

Xác định cơ sở:

Trong $\mathbb{R}^4$ cho một không gian U sinh bởi các véc tơ

$$x_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \; x_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}, \; x_3 = \begin{pmatrix} 3 \\ -4 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}, \; x_4 = \begin{pmatrix} -1 \\ 8 \\ -5 \\ -6 \end{pmatrix}$$

Hãy xác định một cơ sở của U từ các véc tơ trên.

Hệ sinh và cơ sở

Lời giải:

- kiểm tra sự độc lập tuyến tính của x_1, x_2, x_3, x_4 với ma trận:

$$[x_1, x_2, x_3, x_4] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & -1 \\ 2 & -1 & -4 & 8 \\ -1 & 1 & 3 & -5 \\ -1 & 2 & 5 & -6 \end{bmatrix}$$

- Đưa về dạng bậc thang bằng biến đổi sơ cấp theo hàng:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & -1 \\ 2 & -1 & -4 & 8 \\ -1 & 1 & 3 & -5 \\ -1 & 2 & 5 & -6 \end{bmatrix} \sim \cdots \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & -1 \\ 0 & 1 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

- Các phần tử trụ nằm ở các cột 1, 2, và 4, nên các véc tơ x_1, x_2, x_4 độc lập tuyến tính. Do đó, $\{x_1, x_2, x_4\}$ là cơ sở của U.

Tọa độ (coordinates)

Định nghĩa

Giả sử $\mathcal{B} = \{\mathrm{b}_1, \ldots, \mathrm{b}_n\}$ là một cơ sở của không gian véc tơ V. Mỗi véc tơ $x \in \mathcal{V}$, có biểu diễn duy nhất:

$$\mathrm{x} = x_1\,\mathrm{b}_1 + x_2\,\mathrm{b}_2 + \cdots + x_n\,\mathrm{b}_n$$

Bộ số $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ được gọi là tọa độ của x theo cơ sở $\mathcal{B}$, kí hiệu:

$$[\mathrm{x}]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

Tọa độ

Ví dụ: Trong $\mathbb{R}^3$ cho các véc tơ:

$$b_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \ b_2 = \begin{bmatrix} -3 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix}, \ b_3 = \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 3 \end{bmatrix}, \ x = \begin{bmatrix} -8 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Tìm tọa độ của véc tơ x theo cơ sở $\mathcal{B} = \{b_1, b_2, b_3\}$.

Lời giải: Giải hệ phương trình

$$\Leftrightarrow x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} -3 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} 3 \\ -6 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \Rightarrow [x]_{\mathcal{B}} = \begin{bmatrix} -5 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Chuyển cơ sở (change of basis)

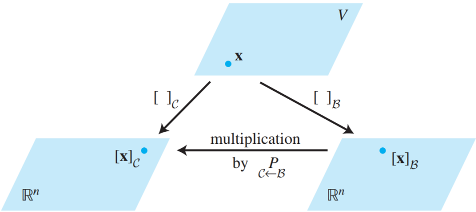
Tọa độ véc tơ khi chuyển cơ sở

Cho $B = \{\mathrm{b}_1, \ldots, \mathrm{b}_n\}$ và $C = \{\mathrm{c}_1, \ldots, \mathrm{c}_n\}$ là hai cơ sở của không gian véc tơ V. Tồn tại duy nhất một ma trận $P_{C \leftarrow B}$, gọi là *ma trận chuyển tọa độ* từ B sang C, sao cho:

$$[\mathrm{x}]_C = P_{C \leftarrow B}[\mathrm{x}]_B$$

với mọi véc tơ $\mathrm{x} \in V$. Các cột của ma trận $P_{C \leftarrow B}$ được cho bởi:

$$P_{C \leftarrow B} = \left[\, [\mathrm{b}_1]_C \ [\mathrm{b}_2]_C \ \cdots \ [\mathrm{b}_n]_C \,\right]$$



Chuyển cơ sở

Xác định ma trận chuyển tọa độ

Trong trường hợp $V = \mathbb{R}^n$, ta tính ma trận chuyển tọa độ từ cơ sở $B = \{\mathrm{b}_1, \ldots, \mathrm{b}_n\}$ sang cơ sở $C = \{\mathrm{c}_1, \ldots, \mathrm{c}_n\}$ như sau:

$$\left[\mathrm{c}_1\, \mathrm{c}_2 \cdots \mathrm{c}_n \,\middle|\, \mathrm{b}_1\, \mathrm{b}_2 \cdots \mathrm{b}_n\right] \sim \left[\, I_n \,\middle|\, P_{C \leftarrow B} \,\right]$$

Ví dụ: Trong $\mathbb{R}^2$ cho:

$$\mathrm{b}_1 = \begin{bmatrix} -9 \\ 1 \end{bmatrix}, \; \mathrm{b}_2 = \begin{bmatrix} -5 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \mathrm{c}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -4 \end{bmatrix}, \; \mathrm{c}_2 = \begin{bmatrix} 3 \\ -5 \end{bmatrix}$$

$$\left[\mathrm{c}_1\, \mathrm{c}_2 \,\middle|\, \mathrm{b}_1\, \mathrm{b}_2\right] = \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 3 & -9 & -5 \\ -4 & -5 & 1 & -1 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 6 & 4 \\ 0 & 1 & -5 & -3 \end{array}\right]$$

$$\Rightarrow P_{C \leftarrow B} = \begin{bmatrix} 6 & 4 \\ -5 & -3 \end{bmatrix}$$

Số chiều của không gian véc tơ

Số chiều (dimension)

- Nếu không gian véc tơ V được sinh bởi một tập hữu hạn, thì V được gọi là *hữu hạn chiều*, và *số chiều* của V, kí hiệu $\dim V$, là số phần tử của một cơ sở của V.
- Số chiều của không gian chỉ gồm véc tơ không $\{0\}$ được quy ước bằng 0.
- Nếu V không được sinh bởi một tập hữu hạn, thì V được gọi là *vô hạn chiều*.

Ví dụ:

- Cơ sở chính tắc của $\mathbb{R}^n$ có n véc tơ, nên $\dim \mathbb{R}^n = n$.
- Không gian đa thức $\mathbb{P}_2$ có một cơ sở gồm $\{1, x, x^2\}$, nên $\dim \mathbb{P}_2 = 3$.
- Không gian các hàm số thực xác định trên $\mathbb{D}$ là vô hạn chiều.

Bài toán hồi quy phi tuyến

- Một số bài toán phân tích mối quan hệ giữa các biến:
  1. Thu nhập y của một kĩ sư phụ thuộc vào trình độ học vấn x_1 và số năm kinh nghiệm x_2.
  2. Giá nhà y phụ thuộc vào diện tích x_1, số phòng ngủ x_2, và khoảng cách đến khu vực trung tâm x_3.
  3. Cường độ chịu nén của đất y phụ thuộc vào địa điểm khảo sát (x_1, x_2) và độ sâu x_3 tính từ mặt đất.
- Trong nhiều trường hợp, mối quan hệ giữa biến phụ thuộc y và một hay nhiều biến độc lập $x_1, x_2, \ldots, x_k$ được mô tả bởi một hàm phi tuyến:

$$y = f(\mathrm{x}; \beta) + \epsilon$$

với $\mathrm{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_k)^T$, $\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$ mô tả sai số ngẫu nhiên, và β là véc tơ tham số của mô hình cần xác định.

Bài toán hồi quy phi tuyến

Curve fitting

Curve fitting là quá trình tìm một đường cong $y = f(x;\beta)$ xấp xỉ tốt nhất tập dữ liệu từ một tập các đường cong cho trước.

Xem lại vấn đề hồi quy tuyến tính

Mô hình hồi quy tuyến tính có dạng:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

là tổ hợp tuyến tính của các hàm $\{1, x\}$, được gọi là các **hàm cơ sở**. Thực tế, hàm hồi quy tuyến tính được tìm trong không gian véc tơ được sinh bởi những hàm cơ sở này.

Bài toán hồi quy phi tuyến

Một số mô hình hồi quy khác

Bất kì một tập các hàm nào cũng có thể dùng làm hàm cơ sở. Các hàm cơ sở được chọn sao cho có khả năng mô tả được tính chất của mối quan hệ giữa các biến:

- *Mô hình đa thức*: $y = b_0 + b_1\,x + \cdots + b_k\,x^k$
- *Mô hình logistic*: $y = \dfrac{K}{1 + e^{-r(t-t_0)}}$
- *Mô hình Michaelis-Menten* (động học enzyme): $y = \dfrac{\theta_1\,x}{\theta_2 + x}$

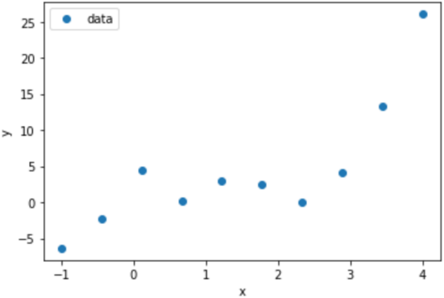
Mô hình đa thức

Bài toán

Xét bài toán tìm hàm hồi quy xấp xỉ dữ liệu sau:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \beta_3 x^3$$

x	y	x	y
-1	-6.375	1.778	2.545
-0.444	-2.211	2.333	0.050
0.111	4.491	2.889	4.134
0.667	0.146	3.444	13.312
1.222	2.987	4	26.058



Mô hình đa thức

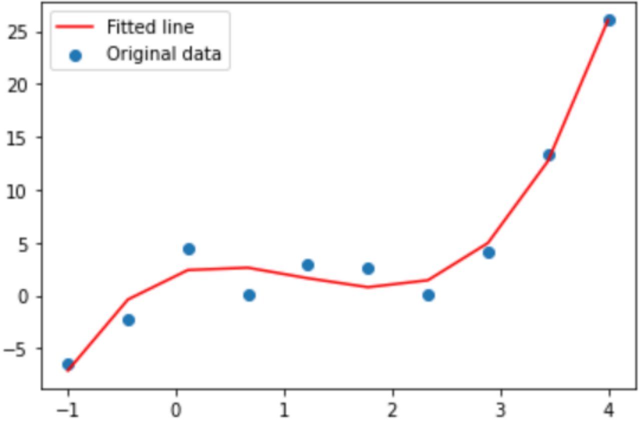
Hồi quy đa thức thuộc lớp các bài toán hồi quy tuyến tính, ở đó tập hàm cơ sở gồm $\{f_0 = 1,\ f_1 = x,\ f_2 = x^2,\ f_3 = x^3\}$:

$$y = \beta_0 f_0 + \beta_1 f_1 + \beta_2 f_2 + \beta_3 f_3$$

```python
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from sklearn.linear_model import LinearRegression

xdata=np.array([-1,-0.444,0.111,0.667,1.222,1.778,2.333,2.889,3.444,4])
ydata=np.array([-6.375,-2.211,4.491,0.146,2.987,2.545,0.050,4.134,13.312,26.

model = LinearRegression(fit_intercept=True)
X = xdata[:, np.newaxis]
X = np.hstack([X,pow(X,2),pow(X,3)])
model.fit(X, ydata)
print(model.intercept_,model.coef_)

plt.scatter(xdata,ydata,label='Original data')
plt.plot(xdata,model.predict(X),'r',label='Fitted line')
plt.legend()
plt.show()
```

Mô hình đa thức

```
2.102068566469035 [ 3.27290977 -4.60391893  1.32031155]
```



Mô hình đa thức

NumPy cung cấp hàm sử dụng cho bài toán hồi quy đa thức:

numpy.polyfit(x, y, n): trả về véc tơ các hệ số của đa thức hồi quy phù hợp nhất với dữ liệu, trong đó

$$\begin{aligned} x &: \text{mảng giá trị của biến } x \\ y &: \text{mảng giá trị của biến } y \\ n &: \text{bậc của đa thức hồi quy} \end{aligned}$$

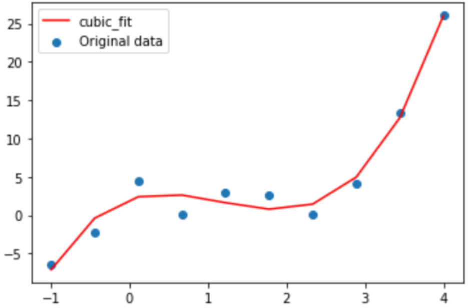
Hàm sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu để xác định đa thức phù hợp nhất với dữ liệu dưới dạng:

$$p(x) = p_0\, x^n + p_1\, x^{n-1} + \cdots + p_n$$

Mô hình đa thức

```
p=np.polyfit(xdata,ydata,3)
print(p)
plt.scatter(xdata, ydata,label='Original data')
plt.plot(xdata, np.polyval(p,xdata),'r',label='cubic_fit')
plt.legend()
plt.show()
```

```
[ 1.32031155 -4.60391893  3.27290977  2.10206857]
```



Mô hình Michaelis-Menten

Mô hình

Trong động học enzyme, tốc độ ban đầu y của một phản ứng enzyme được liên hệ với nồng độ x của chất nền bởi phương trình:

$$y = \frac{\theta_1 x}{\theta_2 + x}$$

Mô hình quy về dạng tuyến tính:

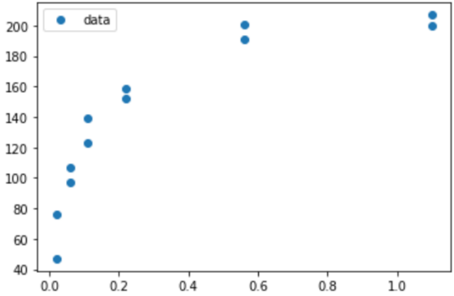
$$\frac{1}{y} = \frac{1}{\theta_1} + \frac{\theta_2}{\theta_1}\frac{1}{x} \qquad \Rightarrow \qquad u = \beta_0 + \beta_1 v$$

trong đó $u = \frac{1}{y},\ v = \frac{1}{x},\ \beta_0 = \frac{1}{\theta_1},\ \beta_1 = \frac{\theta_2}{\theta_1}$.

Mô hình Michaelis-Menten

Dữ liệu và biểu đồ phân tán

Nồng độ x	Tốc độ y
0.02	76
0.02	47
0.06	97
0.06	107
0.11	123
0.11	139
0.22	159
0.22	152
0.56	191
0.56	201
1.10	207
1.10	200

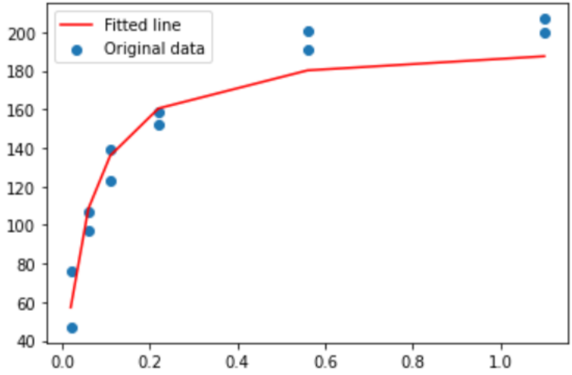


Mô hình Michaelis-Menten

```
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
from sklearn.linear_model import LinearRegression

def func(x,a,b):
    return a*x/(b + x)

xData = np.array([0.02,0.02,0.06,0.06,0.11,0.11,0.22,0.22,0.56,0.56,1.10,1.1
yData = np.array([76,47,97,107,123,139,159,152,191,201,207,200])
vdata=1/xData
udata=1/yData

model = LinearRegression(fit_intercept=True)
V = vdata[:, np.newaxis]
model.fit(V, udata)
print(model.intercept_,model.coef_)
theta1=1/model.intercept_
theta2=theta1*model.coef_[0]
print(theta1,theta2)

plt.scatter(xData,yData,label='Original data')
plt.plot(xData,func(xData,theta1,theta2),'r',label='Fitted line')
plt.legend()
plt.show()
```

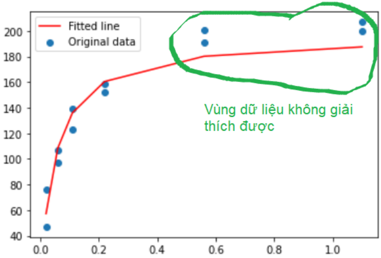
Mô hình Michaelis-Menten

```
0.005107181641585809 [0.00024722]
195.80270884774998 0.04840653386725411
```



Nhận xét

- Nhiều mô hình trong thực tế không thể đưa về dạng tuyến tính.
- Đưa mô hình về dạng tuyến tính có thể làm chệch kết quả. Điều đó xảy ra do các giả thiết về sai số ngẫu nhiên trong mô hình không còn được đảm bảo.
- Chẳng hạn trong ví dụ về mô hình Michaelis-Mendes, đường hồi quy không giải thích được một phần dữ liệu.



Thư viện SciPy

- Cung cấp khả năng thao tác với các mảng NumPy thuận tiện và nhanh chóng.
- Cung cấp nhiều công cụ tính toán số hiệu quả và thân thiện với người dùng, chẳng hạn như các hàm tối ưu hóa số.
- Các thư viện con trong SciPy được tổ chức thành các sub-package.
- Package **scipy.optimize** cung cấp một số các thuật toán tối ưu phổ biến, trong đó có các thuật toán bình phương cực tiểu và curve fitting.

scipy.cluster	Vector quantization / Kmeans
scipy.constants	Physical and mathematical constants
scipy.fftpack	Fourier transform
scipy.integrate	Integration routines
scipy.interpolate	Interpolation
scipy.io	Data input and output
scipy.linalg	Linear algebra routines
scipy.ndimage	n-dimensional image package
scipy.odr	Orthogonal distance regression
scipy.optimize	Optimization
scipy.signal	Signal processing
scipy.sparse	Sparse matrices
scipy.spatial	Spatial data structures and algorithms
scipy.special	Any special mathematical functions
scipy.stats	Statistics

Curve fitting

- Hàm **scipy.optimize.curve_fit**$(f, xdata, ydata, p_0)$: sử dụng phương pháp bình phương tối thiểu để tìm hàm phù hợp nhất với dữ liệu, trong đó

  f : hàm $f(x, \ldots)$, đối số thứ nhất là biến độc lập x, sau đó đến các tham số cần tối ưu hóa,

  $xdata$: mảng dữ liệu quan sát về biến độc lập,

  $ydata$: mảng dữ liệu về biến phụ thuộc,

  p_0 : (optional) giá trị xuất phát cho các tham số, mặc định $= 1$.

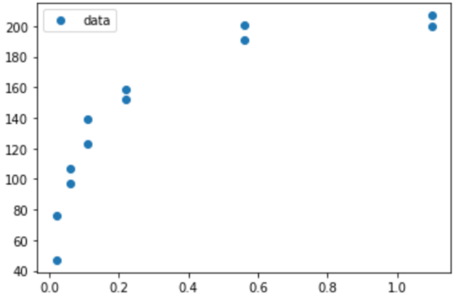
- Để sử dụng hàm **curve_fit**, ta sử dụng lệnh **import**:

```
from scipy.optimize import curve_fit
```

Curve fitting

Mô hình Michaelis-Menten

Nồng độ x	Tốc độ y
0.02	76
0.02	47
0.06	97
0.06	107
0.11	123
0.11	139
0.22	159
0.22	152
0.56	191
0.56	201
1.10	207
1.10	200

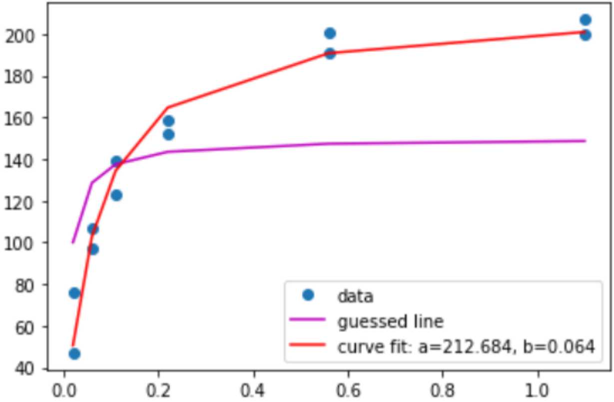


Curve fitting

```python
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import curve_fit
import numpy as np

def func(x,a,b):
    return a*x/(b + x)

xData = np.array([0.02,0.02,0.06,0.06,0.11,0.11,0.22,0.22,0.56,0.56,1.10,1.1
yData = np.array([76,47,97,107,123,139,159,152,191,201,207,200])

g=[150,0.01]
popt, pcov = curve_fit(func,xData,yData,g)

print(popt)
plt.plot(xData, yData, 'o', label='data')
plt.plot(xData,func(xData,*g),'m-',label='guessed line')
plt.plot(xData, func(xData,*popt), 'r-',
         label='curve fit: a=%5.3f, b=%5.3f' % tuple(popt))
plt.legend()
plt.show()
```

Curve fitting

```
[2.12683651e+02 6.41211389e-02]
```



Tài liệu tham khảo

1. Charu C. Aggarwal; Linear Algebra and Optimization for Machine Learning, Springer, 2020.
2. Stephen Boyd, Lieven Vandenberghe; Introduction to Applied Linear Algebra: Vectors, Matrices, and Least Squares, Cambridge University Press, 2018.
3. David C. Lay, Steven R. Lay, Judi J. McDonald; Linear Algebra and Its Applications, Fifth edition, Pearson, 2016
4. Tom Lyche; Numerical Linear Algebra and Matrix Factorizations, Springer, 2020.
5. Gilbert Strang; Linear Algebra and Learning from Data, Wellesley- Cambridge Press, 2019.