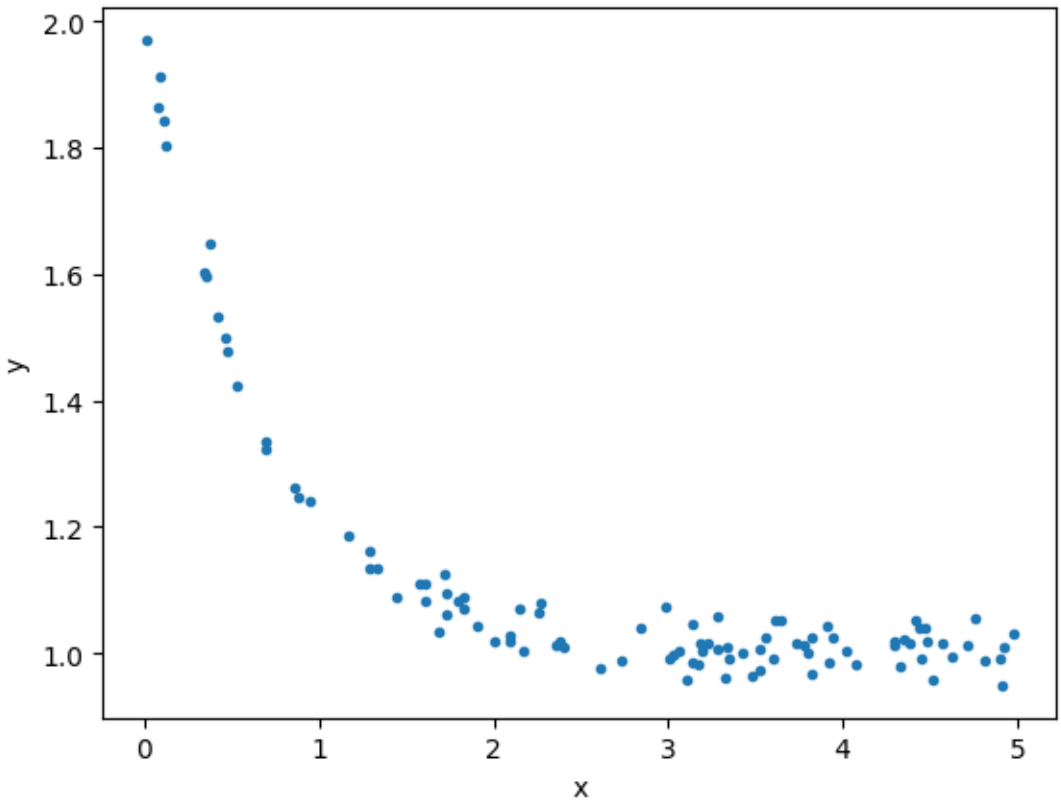
King Mongkut's University of Technology Thonburi
Faculty of Engineering, Department of Computer Engineering
CPE 342 Machine Learning

Assignment 2: Training models via iterative approach (10 points)

Due: 4 Sep 2024. Please submit your report in PDF to LEB2

Gradient Descent

The data below can be downloaded from this link.



Fit the data to the following model,

$$\hat{y} = c_0 + c_1 e^{c_2 x}$$

Perform the following tasks.

Tasks:

1. Write the error/loss function. (1 points)
2. Write the gradient of each coefficients. (3 points)
3. Write the update rules. (1 points)
4. Implement the gradient descent using the given data. (4 points)
5. Show the loss value over iterations and the resulting coefficients. (1 points)

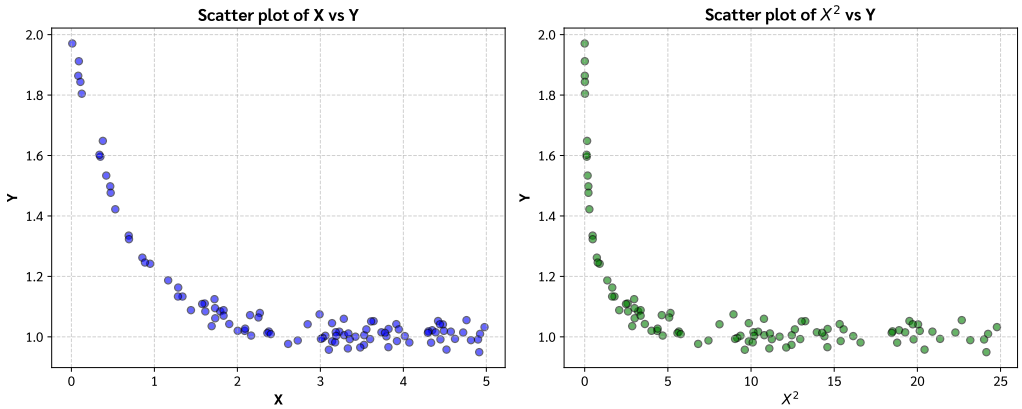
CPE 342 Machine Learning
Assignment 2: Training Models via Iterative Approach

Gradient Descent — Exponential Model Fitting

67070501042 วิศิษฐ์ สุวรรณเนาว์

เป้าหมายของงานนี้คือการฝึกสอนโมเดล (Train model) ด้วยวิธีการ **Gradient Descent (GD)** เพื่อหาพารามิเตอร์ที่เหมาะสมให้กับชุดข้อมูล $n = 100$ จุด โดยกำหนดให้ฟิตข้อมูลเข้ากับโมเดลสมการเอกซ์โพเนนเชียล (Exponential Model):

$$\hat{y} = C_0 + C_1 e^{C_2 x}$$



รูปที่ 1: การวิเคราะห์ข้อมูลเบื้องต้น (EDA) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปร X และ Y (ซ้าย) และตัวแปร X^2 และ Y (ขวา)

1. ฟังก์ชันความสูญเสีย (Loss Function)

สำหรับโมเดล $\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$ เราใช้ฟังก์ชันความสูญเสียแบบ **Mean Squared Error (MSE)** โดยใช้ตัวหารเป็น $2n$ เพื่อความสะดวกในการหาอนุพันธ์:

$$L(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

เมื่อแทนค่า $\hat{y}_i$ ลงไป จะได้:

$$L(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i})\right)^2$$

2. การหาอนุพันธ์ย่อย (Gradient of Each Coefficient)

เพื่อใช้ Gradient Descent เราต้องหาอนุพันธ์ย่อย (Partial derivatives) ของ L เทียบกับพารามิเตอร์แต่ละตัว (C_0, C_1, C_2) โดยอาศัยกฎลูกโซ่ (Chain Rule)

สำหรับพารามิเตอร์ θ ใดๆ:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial \theta} &= \frac{\partial}{\partial \theta}\left[\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2\right] \\ &= \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n} 2\,(y_i - \hat{y}_i)\cdot\frac{\partial}{\partial \theta}(y_i - \hat{y}_i) \\ &= -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)\cdot\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial \theta}\end{aligned}$$

---

1) Gradient เทียบกับ C_0:

ขั้นแรก หา $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_0}$:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_0} = \frac{\partial}{\partial C_0}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = 1$$

แทนค่ากลับลงไปในสมการกฎลูกโซ่:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial C_0} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i})\right)}$$

2) Gradient เทียบกับ C_1:

ขั้นแรก หา $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_1}$:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_1} = \frac{\partial}{\partial C_1}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = e^{C_2 x_i}$$

แทนค่ากลับลงไปในสมการกฎลูกโซ่:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial C_1} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i})\right) e^{C_2 x_i}}$$

3) Gradient เทียบกับ C_2:

ขั้นแรก หา $\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_2}$ โดยใช้กฎลูกโซ่สำหรับฟังก์ชันเอกซ์โพเนนเชียล:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_2} = \frac{\partial}{\partial C_2}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = C_1 \cdot \frac{\partial}{\partial C_2}\left(e^{C_2 x_i}\right) = C_1 \cdot e^{C_2 x_i} \cdot \frac{\partial}{\partial C_2}(C_2 x_i) = C_1 x_i e^{C_2 x_i}$$

แทนค่ากลับลงไปในสมการกฎลูกโซ่:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial C_2} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i})\right) C_1 x_i e^{C_2 x_i}}$$

3. กฎการอัปเดตพารามิเตอร์ (Update Rules)

ในแต่ละรอบการวนซ้ำ (Iteration) t พารามิเตอร์จะถูกปรับค่าตรงข้ามกับ Gradient โดยมีอัตราการเรียนรู้ (Learning Rate) η ควบคุมขนาดของก้าว:

$$C_0^{(t+1)} = C_0^{(t)} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial C_0}$$
$$C_1^{(t+1)} = C_1^{(t)} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial C_1}$$
$$C_2^{(t+1)} = C_2^{(t)} - \eta \cdot \frac{\partial L}{\partial C_2}$$

4. การเขียนโปรแกรม (Gradient Descent Implementation)

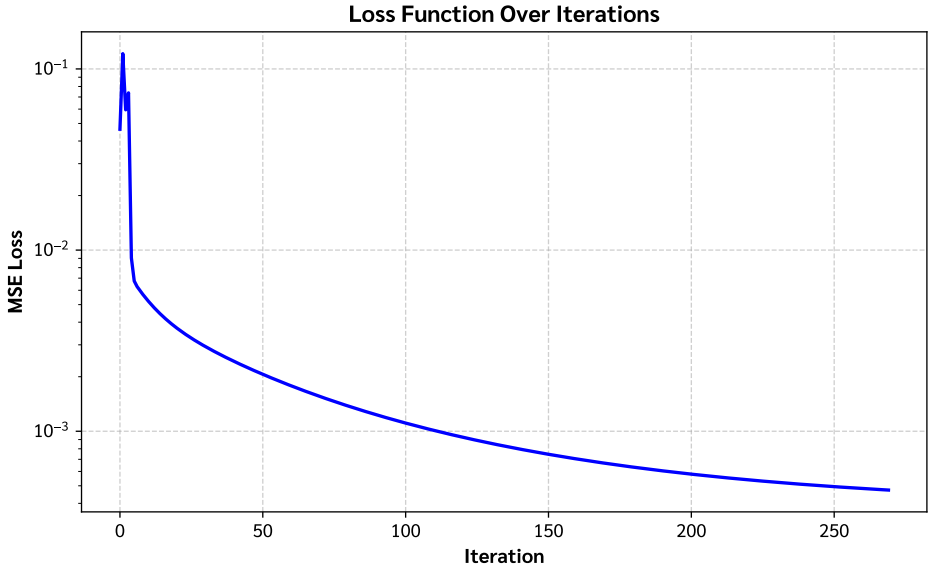
นำสมการ Gradient ที่ได้มาเขียนในรูปแบบโค้ด (Python/NumPy) โดยกำหนด hyperparameters เพื่อให้โมเดล Exponential สามารถฟิตได้อย่างแม่นยำและเสถียร ดังนี้:

- อัตราการเรียนรู้ (Learning Rate, η) = 1.0
- จำนวนรอบการวนซ้ำสูงสุด (Max Iterations) = $2,000$ รอบ
- กำหนดค่าเริ่มต้น (Initial values) $C_0 = 0.5$, $C_1 = 0.5$ และ $C_2 = 0.1$
- กำหนดเกณฑ์หยุดทำงาน (Tolerance) = 10^{-6} เพื่อใช้ทำ Early Stopping หาก Loss ไม่เปลี่ยนแปลง

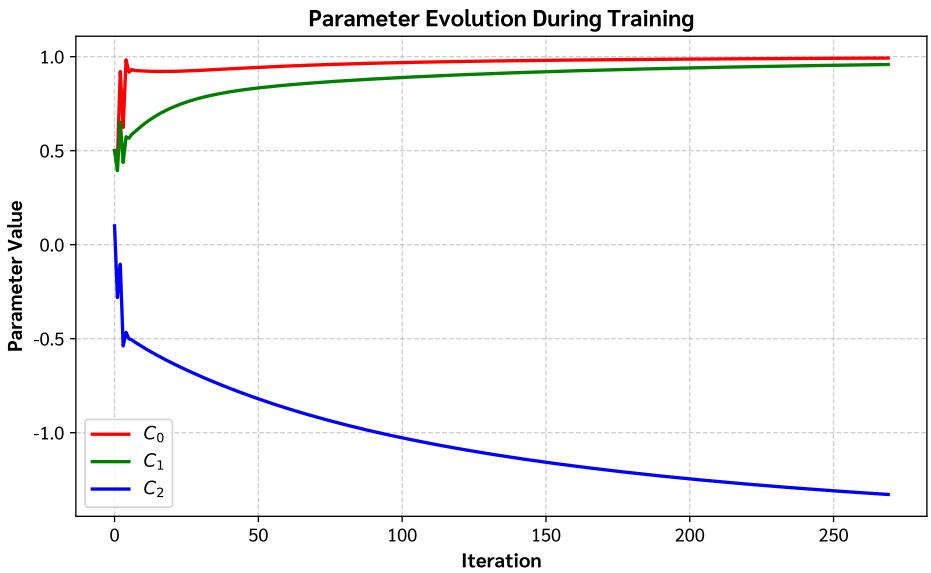
กระบวนการจะทำการอัปเดตค่าพารามิเตอร์ซ้ำๆ และบันทึกค่าพารามิเตอร์กับค่า Loss ในแต่ละรอบ เพื่อนำไปประเมินประสิทธิภาพในขั้นตอนต่อไป

5. ผลลัพธ์และการแสดงภาพ (Results & Visualizations)

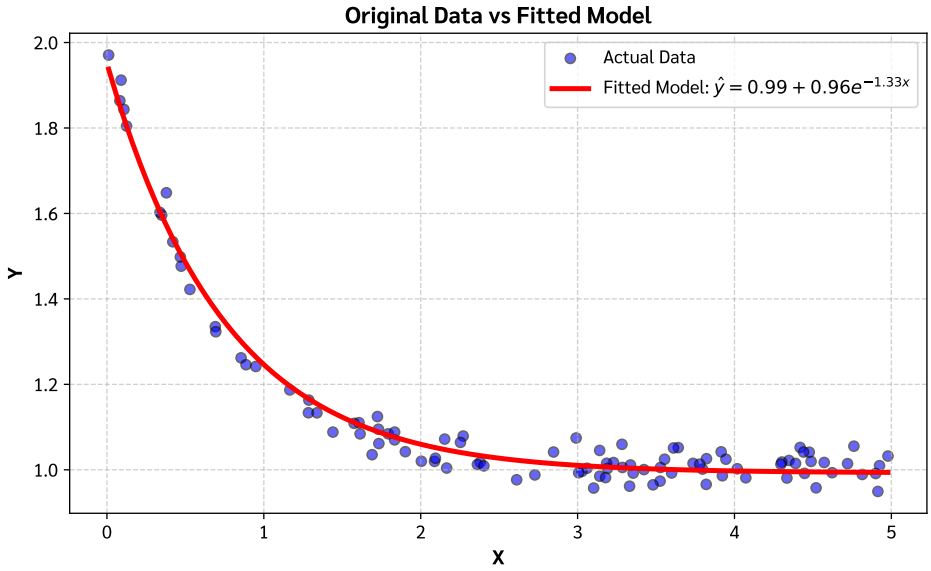
จากผลการฝึกสอนโมเดลด้วย Batch Gradient Descent พบว่าโมเดลสามารถลู่เข้าสู่จุดต่ำสุดสัมพัทธ์ (Convergence) ได้ภายใน **270 รอบ** โดยค่าความคลาดเคลื่อน (Loss) ลดลงอย่างต่อเนื่องจนเสถียร ผลการวิเคราะห์และแสดงภาพของโมเดลมี 4 ส่วนสำคัญดังต่อไปนี้:



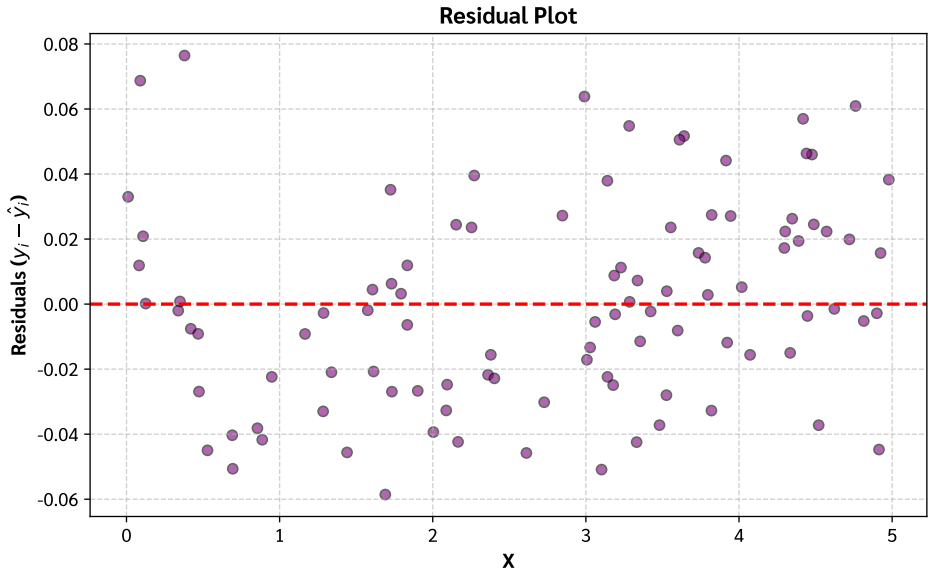
รูปที่ 2: **Learning Curve (Loss vs Iterations):** แสดงการลดลงอย่างรวดเร็วของค่า MSE Loss จากเริ่มต้น 0.0465 สู่ค่าสุดท้าย 0.0005 (ลดลง 98.98%) สะท้อนว่าการเลือก Learning Rate $\eta = 1.0$ มีความเหมาะสม ทำให้โมเดลลู่เข้าได้อย่างราบเรียบโดยไม่มีอาการแกว่ง (Oscillation) หรือหลุดขอบเขต (Overshooting)



รูปที่ 3: **Parameter Evolution:** แสดงเส้นทางการปรับค่าสัมประสิทธิ์ทั้ง 3 ตัว (C_0, C_1, C_2) ในแต่ละรอบการเทรน โดย C_0 ปรับตัวจาก $0.5 \to 0.9927$, C_1 ปรับตัวจาก $0.5 \to 0.9587$ และ C_2 ปรับตัวจาก $0.1 \to -1.3296$ จนลู่เข้าสู่ค่าที่เสถียรอย่างมั่นคง



รูปที่ 4: **Original Data vs Fitted Model:** แสดงการเปรียบเทียบระหว่างข้อมูลจริง 100 จุด กับเส้นโค้งทำนายของโมเดลเอกซ์โพเนนเชียล $\hat{y} = 0.9927 + 0.9587e^{-1.3296x}$ ซึ่งสามารถจับแนวโน้มความสัมพันธ์แบบ Exponential Decay ของข้อมูลได้อย่างแม่นยำและกลมกลืน



รูปที่ 5: **Residual Plot:** แสดงการกระจายตัวของค่าเศษเหลือ ($e_i = y_i - \hat{y}_i$) พบว่าค่า Residuals กระจายตัวแบบสุ่ม (Randomly distributed) รอบแกนสมมาตร 0 และมีความแปรปรวนสม่ำเสมอ (Homoscedasticity) ไร้รูปแบบความโค้งตกค้าง ยืนยันว่าโมเดล Exponential เหมาะสมกับข้อมูลชุดนี้

Extra: การประเมินประสิทธิภาพของโมเดล
(Mathematical Evaluation)

เพื่อประเมินความแม่นยำของแบบจำลอง (Goodness of Fit) ในการทำนายค่า y เราใช้ตัวชี้วัดคือ **Coefficient of Determination (R^2)** ซึ่งมีสูตรทางคณิตศาสตร์ดังนี้:

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$$

โดยที่:

- **Residual Sum of Squares (SS_{res}):** ผลรวมกำลังสองของความคลาดเคลื่อน

$$SS_{res} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \approx 0.0948$$

- **Total Sum of Squares (SS_{tot}):** ผลรวมกำลังสองของความแปรปรวนทั้งหมดของข้อมูล

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2 \approx 5.2020$$

แทนค่าในสูตร:

$$R^2 = 1 - \frac{0.0948}{5.2020} = 1 - 0.0182 = 0.9818$$

สรุป Extra: $\boxed{R^2 \approx 0.9818 \text{ (หรือ } 98.18\%)}$
การตีความค่า R^2: หมายความว่า **98.18% ของความแปรปรวนในตัวแปรเป้าหมาย Y สามารถอธิบายได้ด้วยตัวแปร X ผ่านโมเดล Exponential ที่เทรนขึ้น** บ่งชี้ว่าแบบจำลองมีความแม่นยำและมีความสามารถในการฟิตข้อมูลอยู่ในระดับดีเยี่ยม

สรุปผลลัพธ์ (Summary of Results)

หัวข้อ	ผลลัพธ์และคำตอบ
Task 1	Loss Function: $L(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i})\right)^2$
Task 2	Partial Derivative Gradients: $\frac{\partial L}{\partial C_0} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)$ $\frac{\partial L}{\partial C_1} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)e^{C_2 x_i}$ $\frac{\partial L}{\partial C_2} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)C_1 x_i e^{C_2 x_i}$
Task 3	Update Rules: $C_j^{(t+1)} = C_j^{(t)} - \eta\frac{\partial L}{\partial C_j} \quad (j \in \{0, 1, 2\})$
Task 4	การเทรน Gradient Descent ($\eta = 1.0$, Tolerance $= 10^{-6}$): ลู่เข้าสำเร็จที่รอบที่ **270** (จากขีดจำกัด 2,000 รอบ)
Task 5	ผลลัพธ์สัมประสิทธิ์และค่า Loss: สัมประสิทธิ์: $\mathbf{C_0 \approx 0.9927}$, $\mathbf{C_1 \approx 0.9587}$, $\mathbf{C_2 \approx -1.3296}$ สมการโมเดล: $\hat{y} = \mathbf{0.9927 + 0.9587e^{-1.3296x}}$ MSE Loss: $0.046463 \rightarrow$ **0.000474** (ลดลง **98.98%**)
Extra	Goodness of Fit: $\mathbf{R^2 \approx 0.9818}$ (98.18%) โมเดลมีความแม่นยำสูงมาก

Appendix: Full Jupyter Notebook Code & Output

รายละเอียดต่อไปนี้คือโค้ด Python ที่ใช้แก้ปัญหาข้างต้น พร้อมผลลัพธ์และกราฟ (พิมพ์ด้วยฟอนต์ TH Sarabun New) ซึ่งได้รันจริงจาก Jupyter Notebook

Jupyter Notebook: Assignment_2_GD.ipynb

โค้ดและผลลัพธ์ทั้งหมดด้านล่างเป็นการรันจริงจาก Jupyter Notebook

2. Library & Font Setup

Loading required scientific libraries and configuring the system's Sarabun font to support clear typography and rendering in Matplotlib.

In [1]:

```python
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import matplotlib.font_manager as fm
import os

# --- Robust Sarabun Font Setup ---
font_dir = os.path.join(os.environ.get('LOCALAPPDATA', ''), 'Microsoft', 'Windows', 'Fonts')
sarabun_r_path = os.path.join(font_dir, 'Sarabun-Regular.ttf')
sarabun_b_path = os.path.join(font_dir, 'Sarabun-Bold.ttf')

if os.path.exists(sarabun_r_path):
    fm.fontManager.addfont(sarabun_r_path)
if os.path.exists(sarabun_b_path):
    fm.fontManager.addfont(sarabun_b_path)

plt.rcParams['font.family'] = 'Sarabun'
plt.rcParams['font.size'] = 14
plt.rcParams['axes.unicode_minus'] = False # Prevent minus sign rendering issues

print("Library and font setup complete")
```

Out[1]:

```
Library and font setup complete
```

3. Data Loading & Exploratory Data Analysis (EDA)

Read the data from ‘CPE342_Assignment 2_Data.csv‘ and display the first few rows.

In [2]:

```
# Read data
df = pd.read_csv('CPE342_Assignment 2_Data.csv')
X = df['X'].values
Y = df['Y'].values

# Display first few rows
df.head()
```

Out[2]:

```
X         Y
0  4.072280  0.981321
1  1.724332  1.124653
2  1.901981  1.042435
3  4.914068  0.949332
4  1.165868  1.186925
```

Now, let’s plot scatter plots to observe the relationship and trends between X and Y.

In [3]:

```
# Plot graphs to observe trends
plt.figure(figsize=(12, 5))

# Plot X vs Y
plt.subplot(1, 2, 1)
plt.scatter(X, Y, color='blue', alpha=0.6, edgecolor='k')
plt.title('Scatter plot of X vs Y')
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Y')
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

# Plot X^2 vs Y
plt.subplot(1, 2, 2)
```

```python
plt.scatter(X**2, Y, color='green', alpha=0.6, edgecolor='k')
plt.title('Scatter plot of $X^2$ vs Y')
plt.xlabel('$X^2$')
plt.ylabel('Y')
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

plt.tight_layout()
plt.savefig('plot_1_eda.pdf', bbox_inches='tight')
plt.show()
```

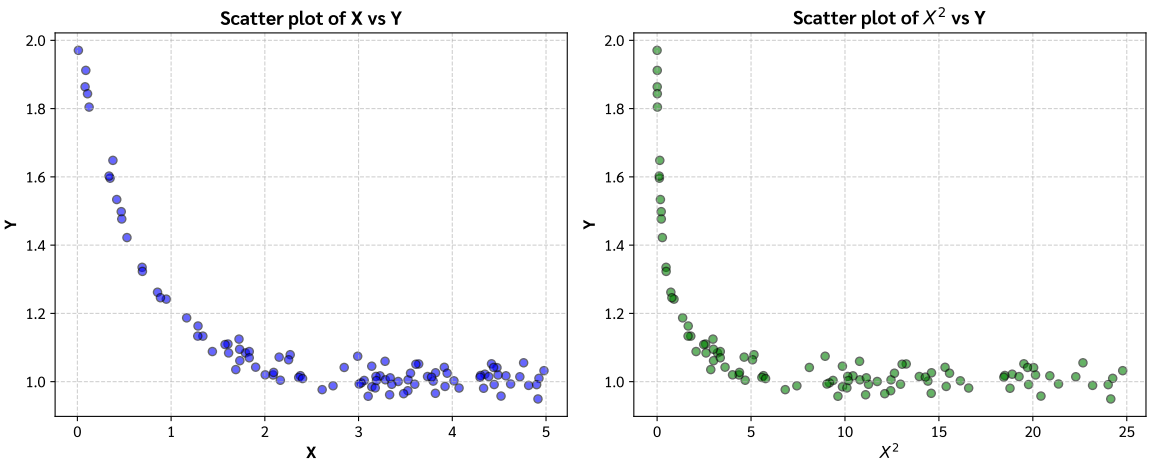


Figure 1 (Exploratory Data Analysis): Scatter plots of X vs. Y and X^2 vs. Y illustrating the non-linear decaying relationship in the dataset, confirming the necessity of fitting an exponential model rather than a simple linear model.

Task 1 — Mean Squared Error (MSE) Loss Function

Given our target exponential model:

$$\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$$

We define the **Mean Squared Error (MSE)** loss function $\mathcal{L}(C_0, C_1, C_2)$ across all n data points, using a conventional factor of $\frac{1}{2n}$ to simplify algebra during differentiation:

$$\mathcal{L}(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Substituting the exponential model equation $\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$ into the loss function yields:

$$\mathcal{L}(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right)\right)^2$$

Task 2 — Derivation of Partial Derivatives (Gradients)

To minimize the loss function $\mathcal{L}$ using Gradient Descent, we calculate the partial derivatives (gradients) with respect to each model parameter (C_0, C_1, C_2) using the **Chain Rule**. **1. General Chain Rule Formulation:**

For any parameter $\theta \in \{C_0, C_1, C_2\}$:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = \frac{\partial}{\partial \theta}\left[\frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2\right]$$

$$= \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial}{\partial \theta}(y_i - \hat{y}_i)^2$$

$$= \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}2(y_i - \hat{y}_i)\cdot\frac{\partial}{\partial \theta}(y_i - \hat{y}_i)$$

$$= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)\cdot\left(-\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial \theta}\right)$$

$$= -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial \theta}$$

2. Gradients with respect to C_0 and C_1:

A) Gradient with respect to C_0: First, differentiate $\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$ with respect to C_0:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_0} = \frac{\partial}{\partial C_0}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = 1 + 0 = 1$$

Substituting this back into the chain rule formula:

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_0} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right)\right)}$$

B) Gradient with respect to C_1: First, differentiate $\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$ with respect to C_1:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_1} = \frac{\partial}{\partial C_1}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = 0 + e^{C_2 x_i} = e^{C_2 x_i}$$

Substituting this back into the chain rule formula:

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_1} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right)\right)e^{C_2 x_i}}$$

3. Gradient with respect to C_2:

First, differentiate $\hat{y}_i = C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}$ with respect to C_2:

$$\frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_2} = \frac{\partial}{\partial C_2}\left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right) = 0 + C_1 \frac{\partial}{\partial C_2}\left(e^{C_2 x_i}\right)$$

Using the exponential derivative chain rule $\frac{d}{du}(e^u) = e^u \frac{du}{dx}$:

$$\frac{\partial}{\partial C_2}\left(e^{C_2 x_i}\right) = e^{C_2 x_i} \cdot \frac{\partial}{\partial C_2}(C_2 x_i) = x_i e^{C_2 x_i}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial \hat{y}_i}{\partial C_2} = C_1 x_i e^{C_2 x_i}$$

Substituting this back into the chain rule formula:

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_2} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i - \left(C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}\right)\right) C_1 x_i e^{C_2 x_i}}$$

4. Summary of Complete Gradients:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_0} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_1} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)e^{C_2 x_i}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_2} = -\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)C_1 x_i e^{C_2 x_i}$$

Task 3 — Parameter Update Rules

In each iteration t of Gradient Descent, the model parameters are updated simultaneously by moving in the negative direction of their respective gradients, scaled by the learning rate η:

$$\theta^{(t+1)} = \theta^{(t)} - \eta \nabla_\theta \mathcal{L}$$

Specifically, for each coefficient:

$$C_0^{(t+1)} = C_0^{(t)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_0}$$

$$C_1^{(t+1)} = C_1^{(t)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_1}$$

$$C_2^{(t+1)} = C_2^{(t)} - \eta \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_2}$$

Where:

- $C_0^{(t)}, C_1^{(t)}, C_2^{(t)}$: Current coefficient values at iteration t
- η: Learning rate (step size hyperparameter)
- $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_0}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_1}, \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial C_2}$: Partial derivative gradients calculated over all n data points

Task 4 — Gradient Descent Implementation

We will now implement the Gradient Descent algorithm in Python using NumPy based on our derived mathematical formulas. **Hyperparameters & Initial Conditions:**

- Learning Rate (η) = '1.0'
- Maximum Iterations ('max_iterations') = '2000'
- Convergence Tolerance ('tolerance') = '1e-6'
- Initial Parameter Guesses: $C_0 = 0.5, C_1 = 0.5, C_2 = 0.1$

In [4]:

```python
# Initialize hyperparameters
learning_rate = 1.0
max_iterations = 2000
tolerance = 1e-6

# Initialize coefficients
C0, C1, C2 = 0.5, 0.5, 0.1
n = len(X)

# Lists to store history for visualization
history_loss = []
history_C0, history_C1, history_C2 = [], [], []

# Gradient Descent Loop
for i in range(max_iterations):
    # Calculate predictions using the exponential model
    exp_term = np.exp(C2 * X)
    Y_pred = C0 + C1 * exp_term

    # Calculate Error
    error = Y - Y_pred

    # Calculate MSE Loss (using 1/(2n))
```

```python
    loss = (1 / (2 * n)) * np.sum(error**2)

    # Store history
    history_loss.append(loss)
    history_C0.append(C0)
    history_C1.append(C1)
    history_C2.append(C2)

    # Calculate Gradients
    grad_C0 = -(1 / n) * np.sum(error)
    grad_C1 = -(1 / n) * np.sum(error * exp_term)
    grad_C2 = -(1 / n) * np.sum(error * C1 * X * exp_term)

    # Update coefficients
    C0 -= learning_rate * grad_C0
    C1 -= learning_rate * grad_C1
    C2 -= learning_rate * grad_C2

    # Early stopping condition
    if i > 0 and abs(history_loss[-1] - history_loss[-2]) < tolerance:
        print(f"Converged at iteration {i}")
        break

print(f"Training completed in {len(history_loss)} iterations.")
print(f"Final Parameters: C0 = {C0:.4f}, C1 = {C1:.4f}, C2 = {C2:.4f}")
print(f"Final MSE Loss: {history_loss[-1]:.4f}")
```

Out[4]:

```
Converged at iteration 269
Training completed in 270 iterations.
Final Parameters: C0 = 0.9927, C1 = 0.9587, C2 = -1.3296
Final MSE Loss: 0.0005
```

Task 5 — Results & Visualizations

In this section, we analyze the training behavior and diagnostic performance of our model through dedicated visualizations.

In [5]:

```
# Plot 1: Learning Curve
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.plot(range(len(history_loss)), history_loss, 'b-', linewidth=2)
plt.xlabel('Iteration')
plt.ylabel('MSE Loss')
plt.title('Loss Function Over Iterations')
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.yscale('log')
plt.savefig('plot_2_loss_curve.pdf', bbox_inches='tight')
plt.show()
```

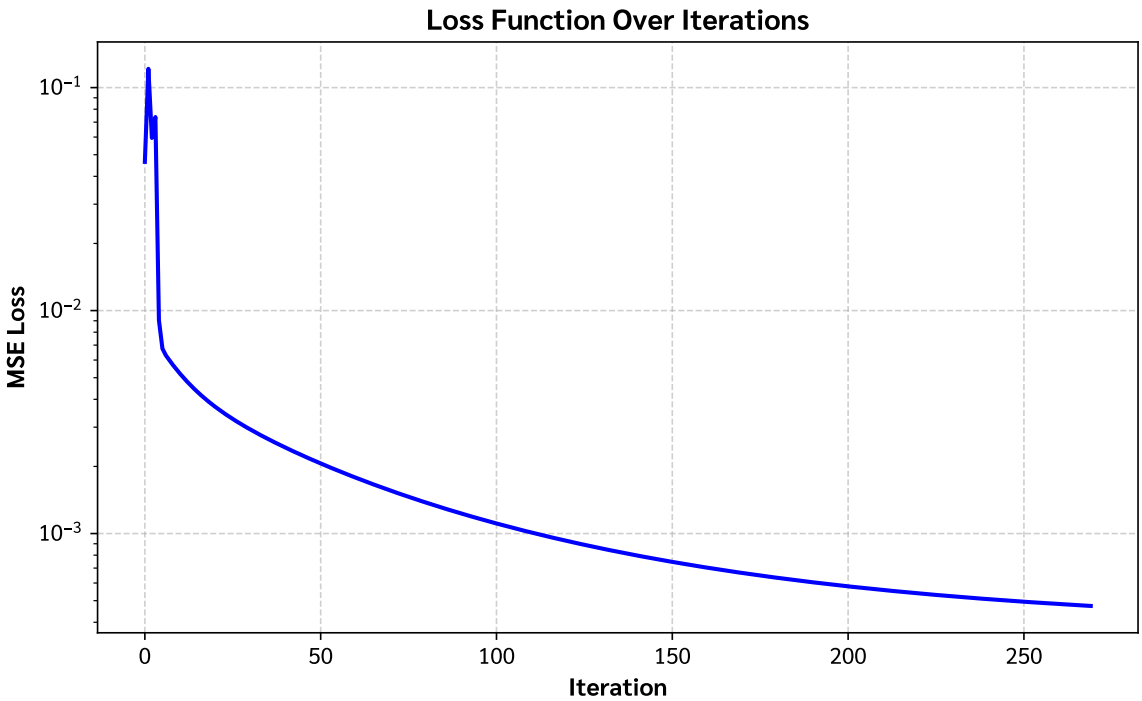


Figure 2 (Learning Curve): Plot of MSE Loss over iterations (logarithmic scale) demonstrating rapid, monotonic convergence of the Gradient Descent algorithm from $0.0465 \to 0.0005$ (a 98.98% reduction).

In [6]:

```
# Plot 2: Convergence of parameters
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.plot(range(len(history_C0)), history_C0, 'r-', label='$C_0$', linewidth=2)
plt.plot(range(len(history_C1)), history_C1, 'g-', label='$C_1$', linewidth=2)
plt.plot(range(len(history_C2)), history_C2, 'b-', label='$C_2$', linewidth=2)
plt.xlabel('Iteration')
plt.ylabel('Parameter Value')
```

```
plt.title('Parameter Evolution During Training')
plt.legend(fontsize=12)
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.savefig('plot_3_coeff_trajectory.pdf', bbox_inches='tight')
plt.show()
```

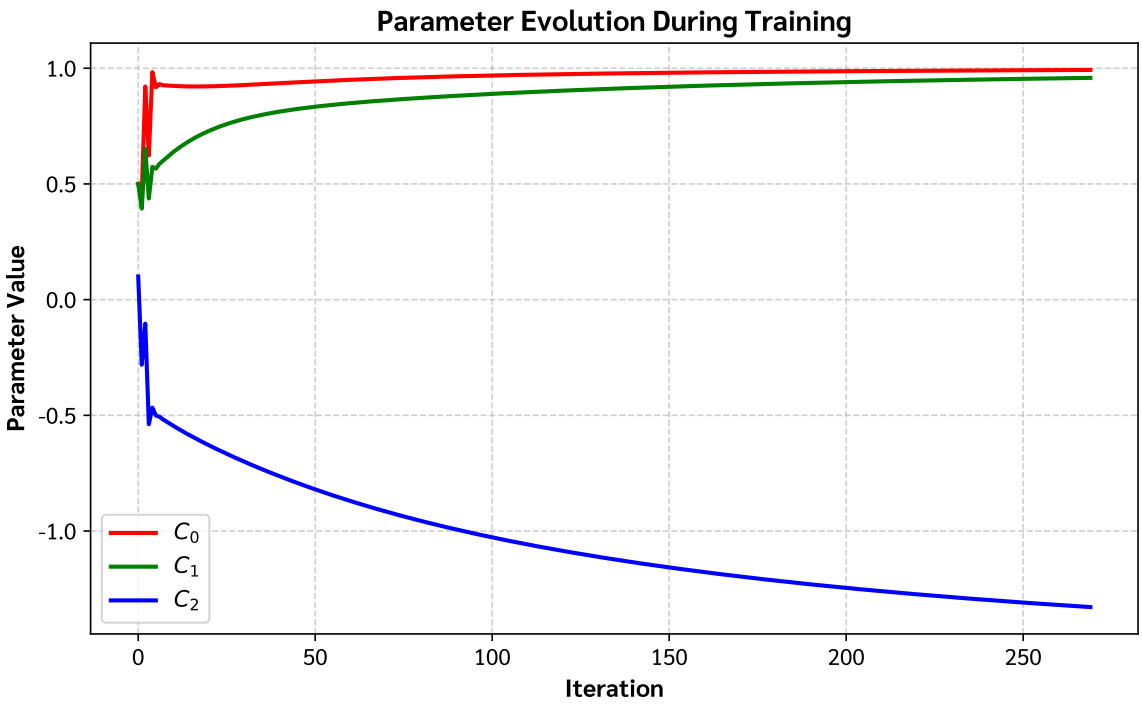


Figure 3 (Parameter Evolution): Trajectories of coefficients C_0, C_1, C_2 across iterations, showing smooth and stable convergence from initial guesses $(0.5, 0.5, 0.1)$ toward optimal parameters $(0.9927, 0.9587, -1.3296)$.

In [7]:

```
# Plot 3: Fitted Curve vs Actual Data
plt.figure(figsize=(8, 5))
x_line = np.linspace(min(X), max(X), 100)
y_line = C0 + C1 * np.exp(C2 * x_line)
plt.scatter(X, Y, color='blue', alpha=0.6, label='Actual Data', edgecolor='k')
plt.plot(x_line, y_line, 'r-', linewidth=3, label=f'Fitted Model: $\\\hat{{y}}
    = {C0:.2f} + {C1:.2f}e^{{{C2:.2f}x}}$')
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Y')
plt.title('Original Data vs Fitted Model')
plt.legend(fontsize=12)
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.savefig('plot_4_fitted_curve.pdf', bbox_inches='tight')
```

```
plt.show()
```

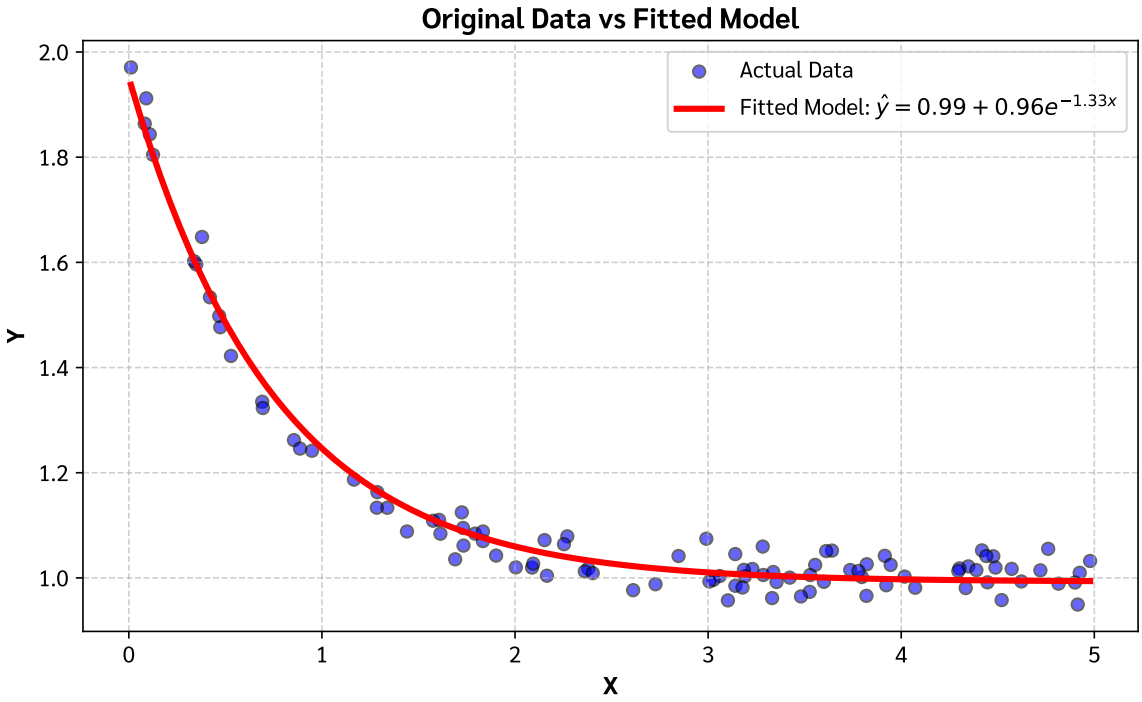


Figure 4 (Fitted Exponential Model): Actual data points plotted against the fitted exponential curve $\hat{y} = 0.9927 + 0.9587e^{-1.3296x}$, showing an accurate fit that captures the non-linear decay of the dataset.

In [8]:

```
# Plot 4: Residuals
plt.figure(figsize=(8, 5))
Y_pred_final = C0 + C1 * np.exp(C2 * X)
residuals = Y - Y_pred_final
plt.scatter(X, residuals, color='purple', alpha=0.6, edgecolor='k')
plt.axhline(0, color='red', linestyle='--', linewidth=2)
plt.xlabel('X')
plt.ylabel('Residuals ($y_i - \\\hat{y}_i$)')
plt.title('Residual Plot')
plt.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
plt.savefig('plot_5_residuals.pdf', bbox_inches='tight')
plt.show()
```

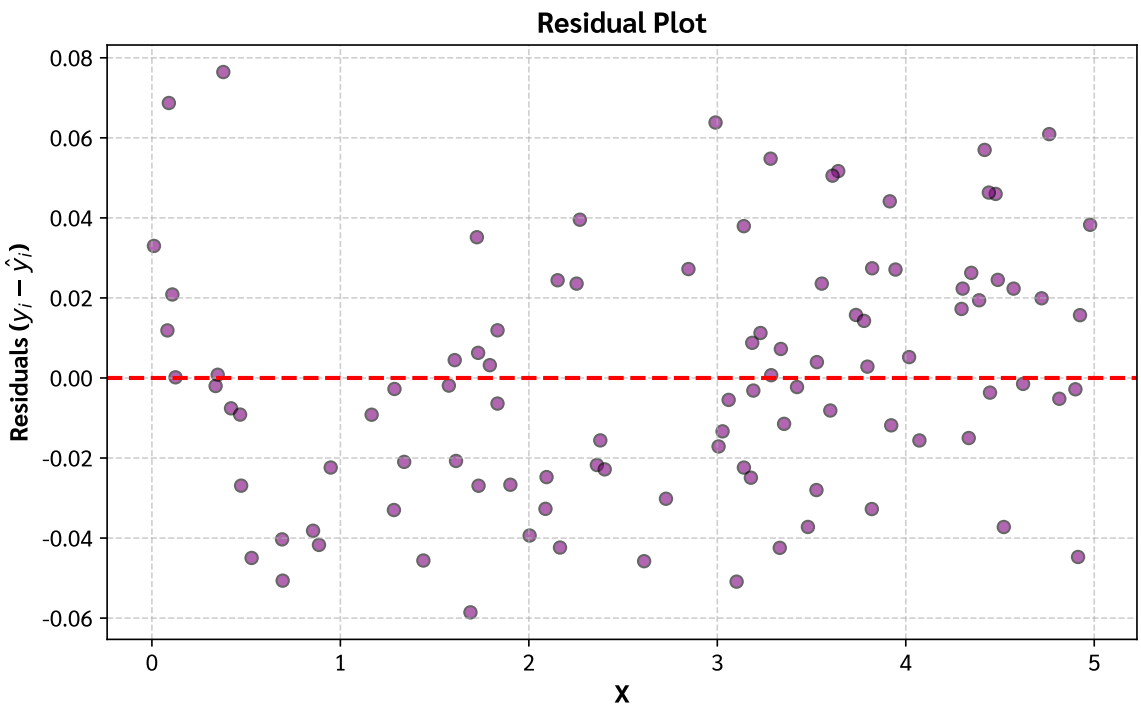


Figure 5 (Residual Plot): Distribution of residuals ($y_i - \hat{y}_i$) scattered randomly around zero with constant variance, validating the assumption of homoscedasticity and confirming the absence of systematic bias.

In [9]:

```
# Multi-panel combined summary dashboard
fig, ((ax1, ax2), (ax3, ax4)) = plt.subplots(2, 2, figsize=(15, 12))

# Plot 1: Learning Curve (Loss over Iterations)
ax1.plot(range(len(history_loss)), history_loss, 'b-', linewidth=2)
ax1.set_xlabel('Iteration')
ax1.set_ylabel('MSE Loss')
ax1.set_title('Loss Function Over Iterations')
ax1.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)
ax1.set_yscale('log')

# Plot 2: Convergence of parameters
ax2.plot(range(len(history_C0)), history_C0, 'r-', label='$C_0$', linewidth=2)
ax2.plot(range(len(history_C1)), history_C1, 'g-', label='$C_1$', linewidth=2)
ax2.plot(range(len(history_C2)), history_C2, 'b-', label='$C_2$', linewidth=2)
ax2.set_xlabel('Iteration')
ax2.set_ylabel('Parameter Value')
ax2.set_title('Parameter Evolution During Training')
ax2.legend()
ax2.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

# Plot 3: Fitted Curve vs Actual Data
ax3.scatter(X, Y, color='blue', alpha=0.6, label='Actual Data', edgecolor='k')
ax3.plot(x_line, y_line, 'r-', linewidth=3, label=f'Fitted Model: $\\\hat{{y}}
    = {C0:.2f} + {C1:.2f}e^{{{C2:.2f}x}}$')
ax3.set_xlabel('X')
ax3.set_ylabel('Y')
ax3.set_title('Original Data vs Fitted Model')
ax3.legend(fontsize=12)
ax3.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

# Plot 4: Residuals
ax4.scatter(X, residuals, color='purple', alpha=0.6, edgecolor='k')
ax4.axhline(0, color='red', linestyle='--', linewidth=2)
ax4.set_xlabel('X')
ax4.set_ylabel('Residuals ($y_i - \\\hat{y}_i$)')
ax4.set_title('Residual Plot')
ax4.grid(True, linestyle='--', alpha=0.6)

plt.tight_layout()
plt.show()
```

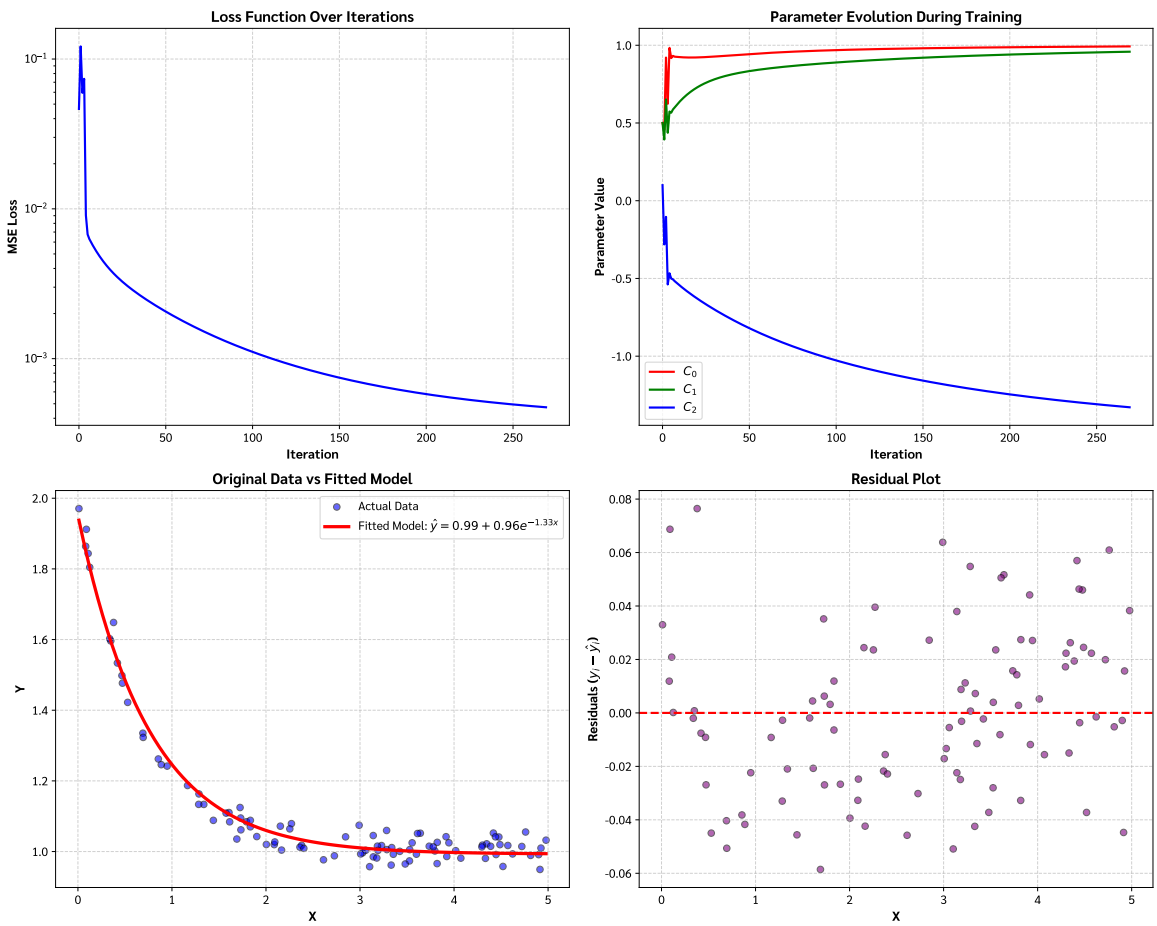


Figure 6 (Comprehensive Training Diagnostics): Multi-panel summary dashboard comparing the learning curve, parameter evolution, non-linear regression curve, and residual distribution in a unified view.

Extra: Model Evaluation (R-squared & Summary Statistics)

To mathematically evaluate the goodness of fit for our machine learning model, we calculate the Coefficient of Determination, also known as R^2. The formula for R^2 is:

$$R^2 = 1 - \frac{SS_{res}}{SS_{tot}}$$

Where:

- **Residual Sum of Squares (SS_{res})** is the sum of squared differences between actual and predicted values:

$$SS_{res} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- **Total Sum of Squares (SS_{tot})** is the sum of squared differences between actual values and their sample mean ($\bar{y}$):

$$SS_{tot} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2$$

A higher R^2 score (0.9818 or 98.18%) indicates that the exponential model captures almost all variation in the data.

In [10]:

```
# Print summary statistics
print("\n=== MODEL EVALUATION SUMMARY ===")
print(f"Fitted parameters: C0 = {C0:.6f}, C1 = {C1:.6f}, C2 = {C2:.6f}")
print(f"Total Iterations: {len(history_loss)}")
print(f"Initial loss: {history_loss[0]:.6f}")
print(f"Final loss: {history_loss[-1]:.6f}")
loss_reduction = (history_loss[0] - history_loss[-1]) / history_loss[0] * 100
print(f"Loss reduction: {loss_reduction:.2f}%")

# Calculate R-squared
Y_mean = np.mean(Y)
ss_res = np.sum((Y - Y_pred_final)**2)
ss_tot = np.sum((Y - Y_mean)**2)
r_squared = 1 - (ss_res / ss_tot)
print(f"Residual Sum of Squares (SS_res): {ss_res:.6f}")
print(f"Total Sum of Squares (SS_tot): {ss_tot:.6f}")
print(f"R-squared (R^2): {r_squared:.6f}")
```

Out[10]:

```
=== MODEL EVALUATION SUMMARY ===
Fitted parameters: C0 = 0.992665, C1 = 0.958671, C2 = -1.329637
Total Iterations: 270
Initial loss: 0.046463
Final loss: 0.000474
Loss reduction: 98.98%
Residual Sum of Squares (SS_res): 0.094527
Total Sum of Squares (SS_tot): 5.185142
R-squared (R^2): 0.981770
```

Summary of Results

Task / Item	Formulation / Output	Description & Meaning
Task 1: Loss Function	$\mathcal{L}(C_0, C_1, C_2) = \frac{1}{2n}\sum(y_i - (C_0 + C_1 e^{C_2 x_i}))^2$	Mean Squared Error (MSE) objective function
Task 2: Gradients	$\nabla\mathcal{L} = \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial C_0}, \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial C_1}, \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial C_2}\right]^T$	Analytical gradients derived via Chain Rule
Task 3: Update Rules	$C_j^{(t+1)} = C_j^{(t)} - \eta\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial C_j}$	Simultaneous parameter updates ($\eta = 1.0$)
Task 4: Implementation	Convergence in **270 iterations**	Trained using NumPy batch gradient descent
Task 5: Final Model	$\hat{y} = 0.9927 + 0.9587e^{-1.3296x}$	$C_0 \approx 0.9927, C_1 \approx 0.9587, C_2 \approx -1.3296$
Task 5: Loss Reduction	$0.046463 \to 0.000474$	Total MSE loss reduction of **98.98%**
Extra: Goodness of Fit	$R^2 \approx 0.9818$ (98.18%)	Model explains **98.18%** of target variance