Phân Tích và Xây Dựng Mô Hình Dự Đoán Nồng Độ CO Trong Không Khí

Phạm Đức Thể
1,2,3 and Đỗ Trọng Hợp 1,2,4

Dại Học Công Nghệ Thông Tin TP.HCM, Việt Nam
² Đại Học Quốc Gia TP.HCM, Việt Nam
³ 19522253@gm.uit.edu.vn
⁴ hopdt@uit.edu.vn

Tóm tắt nôi dung Chất lượng không khí có ảnh hưởng không nhỏ đến sức khỏe con người. Ô nhiễm không khí dẫn đến một loạt các vấn đề sức khỏe, đặc biệt là ở trẻ em. Một trong những tác nhân ảnh hưởng đến chất lượng không khí là Carbon Monoxide (CO). Dự đoán nồng độ CO trong không khí nhằm đưa ra các cảnh báo sớm, kịp thời cho phép chính phủ và các tổ chức liên quan khác thực hiện các bước cần thiết để bảo vệ những người dễ bị tổn thương nhất, khỏi tiếp xúc với không khí có chất lượng nguy hiểm. Trong báo cáo này, chúng tôi thực hiện phân tích và xây dựng mô hình dự đoán nồng độ CO trong không khí trên bộ dữ liệu Air Quality. Quá trình xử lý missing values, chúng tôi tạo ra 2 bộ dữ liệu REMOVE và MEAN. Sau quá trình phân tích ANOVA, chúng tôi thu được các bộ dữ liệu: REMOVE gốc, REMOVE ANOVA đơn thuộc tính, REMOVE ANOVA tương tác 2 thuộc tính, MEAN gốc và MEAN ANOVA tương tác 2 thuộc tính. Trong phần thực nghiệm, chúng tôi sử dung các thuật toán Machine Learning và Deep Learning để so sánh kết quả thông qua các độ đo: \mathbb{R}^2 , MSE, RMSE, MAE. Kết quả tốt nhất theo độ đo RMSE là 0.3789 sử dụng Support Vector Regression trên bộ dữ liệu REMOVE ANOVA đơn thuộc tính.

Keywords: Air Quality · Exploratory Data Analysis · Missing Values · ANOVA · Linear Regression · Decision Tree Regression · Random Forest Regression · Support Vector Regression · Neural Network.

1 Giới Thiệu

Ô nhiễm không khí là sự thay đổi lớn trong thành phần của không khí, chủ yếu do khói, bụi, hơi hoặc các khí lạ được đưa vào không khí, có sự tỏa mùi, làm giảm tầm nhìn xa, gây biến đổi khí hậu, gây bệnh cho con người và cũng có thể gây hại cho sinh vật khác như động vật và cây lương thực, nó có thể làm hỏng môi trường tự nhiên hoặc xây dựng. Hoạt động của con người và các quá trình tự nhiên có thể gây ra ô nhiễm không khí. Một chất gây ô nhiễm không khí là một chất trong không khí có thể gây hại cho con người và hệ sinh thái. Chất này có thể là các hạt rắn, giọt chất lỏng, hoặc khí. Các chất gây ô nhiễm không khí phổ biến như: Carbon Dioxide (CO_2) , Sulfur Oxide (SOx), Oxide

Nitơ (NOx), Carbon Monoxide (CO), các hạt mịn (PM), Amonia (NH_3) , Ozone (O_3) , . . . Trong đó, CO là một loại khí không màu, không mùi, độc nhưng không gây kích thích. Nó là sản phẩm của sự đốt cháy không đầy đủ của nhiên liệu như khí tự nhiên, than đá hoặc gỗ. Khói xả từ các phương tiện giao thông là một nguồn chính của CO. Nồng độ CO trong không khí có ảnh hưởng trực tiếp đến chất lượng không khí và sức khỏe của con người.

Dự đoán nồng độ CO trong không khí nhằm đánh giá mức độ ô nhiễm không khi do tác nhân khí CO gây ra, từ đó giúp đưa ra các cảnh báo kịp thời cho phép chính phủ và các tổ chức liên quan khác thực hiện các bước cần thiết để bảo vệ những người dễ bị tổn thương nhất, khỏi tiếp xúc với không khí có chất lượng nguy hiểm. Báo cáo này nhằm mục đích phân tích và xây dựng một mô hình có thể xem xét dữ liệu chất lượng không khí đã được ghi lại trước đó và dự đoán nồng đồ CO trong không khí.

Trong báo cáo này, trước tiên chúng tôi trình bày về bộ dữ liệu Air Quality được sử dụng cho bài toán và các bước tiền xử lý dữ liệu cơ bản như: xử lý kiểu dữ liệu và xử lý missing values. Từ góc độ xử lý missing values, chúng tôi xem xét 2 loại chiến lược xậy dựng bộ dữ liệu là REMOVE và MEAN. REMOVE – xóa tất cả các dòng dữ liệu bị missing values của thuộc tính CO_GT. MEAN – gán các missing values bằng giá trị trung bình của thuộc tính CO_GT (Phấn 2). Sau đó, chúng tôi tiến hành phân tích khám phá bộ dữ liệu trong Phần 3. Hướng tiếp cận bài toán được mô tả chi tiết trong Phần 4. Quy trình phân tích ANOVA trên từng bộ dữ liệu được trình bày đầy đủ trong Phần 5. Trong Phần 6, chúng tôi tiến hành thực nghiệm và phân tích kết quả của các mô hình Machine Learning và Deep Learning trên các bộ dữ liệu khác nhau. Cuối cùng, chúng tôi rút ra kết luận ở Phần 7.

2 Bộ Dữ Liệu

2.1 Bộ dữ liệu gốc

Bô dữ liêu chúng tôi sử dung trong báo cáo này có tên là Air Quality Data Set được lấy từ UCI Machine Learning Repository, một trang web cung cấp dữ liệu miễn phí cho các dự án về machine learning [1, 2]. Bộ dữ liệu chứa 9,357 dòng dữ liệu và 15 thuộc tính là các phản hồi trung bình hàng giờ từ một loạt 5 cảm biến hóa học oxit kim loại được nhúng trong Thiết bị đa cảm biến hóa học chất lượng không khí (Air Quality Chemical Multisensor Device). Thiết bị được đặt trên cánh đồng ở một khu vực bị ô nhiễm nghiệm trong, trong một thành phố của Italian. Dữ liệu được ghi lại từ tháng 3 năm 2004 đến tháng 2 năm 2005 (một năm). Nồng độ trung bình hàng giờ của Ground Truth (GT) đối với CO, Non Metanic Hydrocarbons, Benzene, Total Nitrogen Oxides (NOx) và Nitrogen Dioxide (NO2) và được cung cấp bởi một máy phân tích tham chiếu (reference analyzer) được chứng nhân đặt cùng vi trí. Bộ dữ liệu có nhiều *qiá tri bi thiếu* (missing values), các missing values này được gán với giá tri -200. Bô dữ liêu này có thể được sử dụng riêng cho mục đích nghiên cứu. Mục đích thương mại được loại trừ hoàn toàn. Thông tin chi tiết về các thuộc tính của bộ dữ liệu được thể hiện trong Bảng 1

Index	Thuộc tính	Ý nghĩa
0	DATE	Ngày (DD/MM/YYYY).
1	TIME	Thời gian trong ngày (HH.MM.SS) (24 giờ).
2	CO(GT)	Nồng độ CO trung bình thực sự hàng giờ (mg/m^3) .
3	PT08.S1(CO)	Phản hồi cảm biến trung bình hàng giờ
3	r 106.51(CO)	(Thiếc oxit - nominally CO targeted).
4	NMHC(GT)	Nồng độ tổng thể của HydroCarbons Non Metanic
4	NMIIC(G1)	trung bình thực sự hàng giờ $(microg/m^3)$.
5	C6H6(GT)	Nồng độ Benzen trung bình thực sự hàng giờ $(microg/m^3)$.
6	PT08.S2(NMHC)	Phản hồi cảm biến trung bình hàng giờ
	1 100.52(WIIIC)	(Titania - nominally NMHC targeted).
7	NOx(GT)	Nồng độ NOx trung bình thực sự hàng giờ (ppb).
8	PT08.S3(NOx)	Phản hồi cảm biến trung bình hàng giờ
	1 100.55(NOX)	(Oxit vonfram - nominally NOx targeted).
9	NO2(GT)	Nồng độ NO2 trung bình thực sự hàng giờ $(microg/m^3)$.
10	PT08.S4(NO2)	Phản hồi cảm biến trung bình hàng giờ
10	1 100.54(1102)	(Oxit vonfram - nominally NO2 targeted).
11	PT08.S5(O3)	Phản hồi cảm biến trung bình hàng giờ
11	. ,	(Oxit indium - nominally O3 targeted).
12	T	Temperature - Nhiệt độ (°C).
13	RH	Relative Humidity - Độ ẩm tương đối (%).
14	AH	Absolute Humidity - Độ ẩm tuyệt đối.

Bảng 1: Thông tin chi tiết của các thuộc tính.

2.2 Tiền xử lý dữ liêu

Dữ liệu tốt đóng vai tối trò quan trọng trong việc tạo ra các mô hình dự báo có độ chính xác cao và tổng quát hóa. Để có được bộ dữ liệu tốt ứng với từng tác vụ thì ta có những cách xử lý dữ liệu khác nhau, trước tiên ta cần phải kiểm tra các insight đầu tiên và cơ bản của bộ dữ liệu, sau đó sẽ nêu ra các hướng giải quyết, làm sạch dữ liệu để có được dữ liệu tốt cho bài toán. Đối với bài toán dự đoán nồng độ CO trong không khí sử dụng bộ dữ liệu Air Quality Data Set, chúng tôi tiến hành đọc dữ liệu và hiển thị ra như Hình 1 và 2a để kiểm tra các vấn đề cơ bản của một bộ dữ liệu như: số lượng điểm dữ liệu, số lượng thuộc tính, kiểu dữ liệu và missing values. Từ Hình 1 và 2a, ta có 2 vấn đề cần xử lý là datatype (các thuộc tính bị sai kiểu dữ liệu) và missing values (dữ liệu bị thiếu).

Datatype Có 5 thuộc bị sai kiểu dữ liệu gồm: CO_GT, C6H6_GT, T, RH, AH. 5 thuộc tính này bị gán sai kiểu dữ liệu là object, ta cần chuyển chúng về với đúng kiểu dữ liệu là float64. Với thuộc tính DATE và TIME có kiểu dữ liệu là object chúng tôi tiến hành nối chúng lại và chuyển về kiểu dữ liệu datetime64. Kết quả của quá trình xử lý này được thể hiện ở Hình 2b.

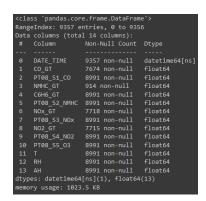
Missing values Hình 3a thể hiện số lượng và tỉ lệ missing values của từng thuộc tính trong bộ dữ liệu, với những thuộc tính có tỉ lệ missing values trên

4 Phạm Đức Thể, Đỗ Trọng Hợp

	DATE	TIME	CO_GT	PT08_S1_C0	NMHC_GT	C6H6_GT	PT08_S2_NMHC	NOx_GT	PT08_S3_N0x	NO2_GT	PT08_S4_N02	PT08_S5_03	T	RH	АН
0	10/03/2004	18.00.00		1360.0	150.0		1046.0	166.0	1056.0		1692.0	1268.0		48,9	0,7578
1	10/03/2004	19.00.00		1292.0		9,4	955.0	103.0	1174.0	92.0	1559.0	972.0		47,7	0,7255
2	10/03/2004	20.00.00		1402.0	88.0		939.0	131.0	1140.0	114.0	1555.0	1074.0		54,0	0,7502
3	10/03/2004	21.00.00		1376.0	80.0		948.0	172.0	1092.0	122.0	1584.0	1203.0		60,0	0,7867
4	10/03/2004	22.00.00			51.0		836.0	131.0	1205.0	116.0	1490.0	1110.0		59,6	0,7888
5	10/03/2004	23.00.00	1,2	1197.0	38.0	4,7	750.0	89.0	1337.0	96.0	1393.0	949.0	11,2	59,2	0,7848
6	11/03/2004	00.00.00	1,2	1185.0	31.0		690.0		1462.0		1333.0	733.0	11,3	56,8	0,7603
7	11/03/2004	01.00.00		1136.0	31.0		672.0	62.0	1453.0	76.0	1333.0	730.0		60,0	0,7702
8	11/03/2004	02.00.00		1094.0	24.0		609.0	45.0	1579.0	60.0	1276.0	620.0		59,7	0,7648
9	11/03/2004	03.00.00	0,6	1010.0	19.0	1,7	561.0	NaN	1705.0	NaN	1235.0	501.0		60,2	0,7517

Hình 1: Thông tin 10 điểm dữ liệu đầu tiên của bộ dữ liệu.

(a) Datatype ban đầu



(b) Datatype sau khi xử lý

Hình 2: Thông tin bộ dữ liệu

50% (NMHC_GT) chúng tôi sẽ loại bỏ trực tiếp thuộc tính đó khỏi bộ dữ liệu. Sau khi xóa bỏ thuộc tính NMHC_GT, ta còn lại số lượng và tỉ lệ missing values của các thuộc tính như Hình 3b. Ta thấy, thuộc CO_GT có số lượng missing values cao nhất (1683 ~ 18%) mà thuộc tính này lại là thuộc tính mục tiêu cần dự đoán của bài toán. Nên chúng tôi đề xuất 2 chiến lược để xử lý như sau: (1) **REMOVE**: Xóa tất cả các dòng dữ liệu bị missing values của thuộc tính CO_GT. (2) **MEAN**: Điền các missing values bằng giá trị trung bình của thuộc tính CO_GT. Sau khi xử lý missing values của thuộc tính CO_GT xong, với các missing values ở các thuộc tính khác chúng tôi tiến hành điền các missing values bằng giá trị trung bình của từng thuộc tính. Cuối cùng chúng tôi thu được 2 bộ dữ liệu mới ứng với 2 chiến lược xử lý missing values là: Air Quality–REMOVE và Air Quality–MEAN (goi tắt là REMOVE và MEAN).

	NMHC_GT	CO_GT	NO2_GT	NOx_GT	PT08_S1_C0	С6Н6_GT	PT08_S2_NMHC	PT08_S3_N0x	PT08_S4_N02	PT08_S5_03				DATE_TIME
Total	8443.000	1683.000	1642.000	1639.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	
Percent	90.232	17.987	17.548											

(a) Missing values của tạt cá các thuộc tinh của bộ du hệu.

	CO_GT	NO2_GT	NOx_GT	PT08_S1_C0	C6H6_GT	PT08_S2_NMHC	PT08_S3_N0x	PT08_S4_N02	PT08_S5_03	Т	RH	АН	DATE_TIME
Total	1683.000	1642.000	1639.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	366.000	
Percent	17.987	17.548	17.516							3.912	3.912	3.912	0.0

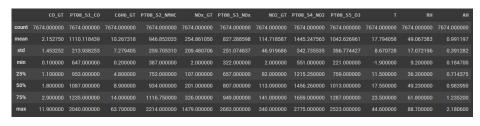
(b) Missing values của các thuộc tính sau khi bỏ đi thuộc tính NMHC GT.

Hình 3: Missing values

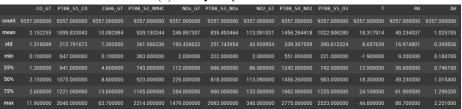
3 Exploratory Data Analysis

3.1 Thống kê mô tả

Thống kê mô tả được sử dụng để mô tả những đặc tính cơ bản của dữ liệu. Hình 4a và 4b lần lượt là thống kê mô tả chi tiết các thuộc tính của 2 bộ dữ liệu, cho biết các thông tin như: count - số lượng các điểm dữ liệu, mean - giá trị trung bình, std - độ lệch chuẩn, min - giá trị nhỏ nhất, 25% - tứ phân vị thứ nhất, 50% - tứ phân vị thứ hai (median - trung vị), 75% - tứ phân vị thứ ba, max - giá trị lớn nhất.



(a) Air Quality–REMOVE.



(b) Air Quality-MEAN.

Hình 4: Thống kê mô tả của các bộ dữ liệu.

3.2 Ma trận tương quan

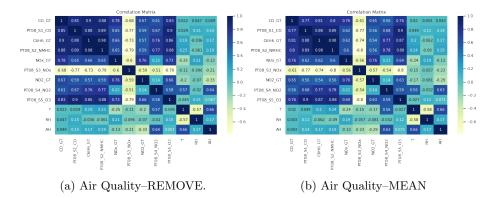
 $H\hat{e}$ số tương quan (Correlation coefficient) [3] là chỉ số thống kê đo lường mức độ mạnh yếu của mối quan hệ giữa hai thuộc tính. Hệ số tương quan Pearson (r) có giá trị giao động trong khoảng liên tục từ -1 đến +1:

- r = 0: Hai biến không có tương quan tuyến tính.
- r = 1; r = -1: Hai biến có mối tương quan tuyến tính tuyệt đối.
- r < 0: Hệ số tương quan âm. Nghĩa là giá trị biến x tăng thì giá trị biến y giảm và ngược lai, giá tri biến y tăng thì giá tri biến x giảm.
- -r > 0: Hệ số tương quan dương. Nghĩa là giá trị biến x tăng thì giá trị biến y tăng và ngược lại, giá trị biến y tăng thì giá trị biến x cũng tăng.

Hệ số tương quan pearson (r) chỉ có ý nghĩa khi và chỉ khi mức ý nghĩa quan sát nhỏ hơn mức ý nghĩa $\alpha = 5\%$.

- Nếu r thuộc khoảng từ 0.50 đến \pm 1, thì nó được cho là tương quan mạnh.
- Nếu r thuộc khoảng từ 0.30 đến \pm 0.49, thì nó được gọi là tương quan trung bình.
- Nếu r nằm dưới \pm 0.29, thì nó được gọi là một mối tương quan yếu.

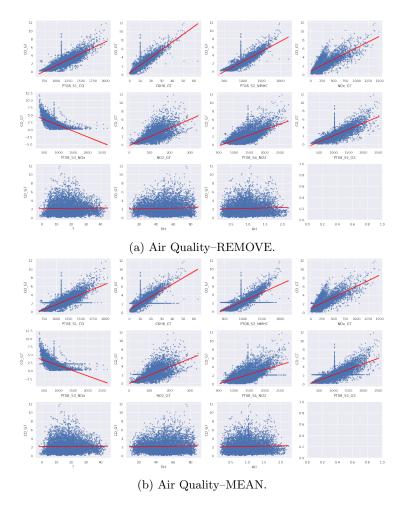
Ma trận tương quan (Correlation Matrix) là một bảng thể hiện hệ số tương quan giữa các biến khi ta có nhiều hơn 2 biến trong bộ dữ liệu. Mỗi ô trong bảng hiển thị mối tương quan giữa hai biến. Hình 5 thể hiện mối quan quan giữa các thuộc tính trong bộ dữ liệu. Dựa vào định nghĩa mức độ tương quan trên ta có: các thuộc tính tương quan yếu với thuộc tính CO_GT trên cả 2 bộ dữ liệu là: AH, RH, T; các thuộc tính tương quan mạnh với thuộc tính CO_GT trên cả 2 bộ dữ liệu là: PT08_S1_CO, C6H6_GT, PT08_S2_NMHC, PT08_S3_NOx, PT08_S4_NO2, NOx_GT, NO2_GT, PT08_S5_O3; không có thuộc tính nào tương quan trung bình với thuộc tính CO_GT trên cả 2 bộ dữ liệu. Hệ số tương quan của bộ dữ liệu REMOVE lớn hơn MEAN ở hầu hết các thuộc tính.



Hình 5: Correlation Matrix

3.3 Regression plot

Regression plot thể hiện mức độ phụ thuộc lẫn nhau của các biến khác nhau (mối tương quan giữa các biến), các đường hồi quy được sinh ra dựa trên hệ số tương quan. Hình 6 thể hiện mối tương quan giữa thuộc tính CO_GT với các thuốc tính còn lại trong bộ dữ liệu (trực quan hệ số tương quan của thuộc tính CO_GT với các thuộc tính khác ở Hình 5). Qua đây, ta có thể thấy rõ hơn về mối quan hệ tương quan tuyến tính của các thuộc tính với biến mục tiêu CO_GT. Các thuộc tính T, RH, AH hầu như không có mối quan hệ tương quan tuyến tính với biến mục tiêu, các thuộc tính còn lại đều có mối quan hệ tương quan tuyến tính với biến mục tiêu (đặc biệt thuộc tính PT08_S1_NOx có tương quan không đồng thuận với biến mục tiêu (tương quan âm - nghịch biến)).



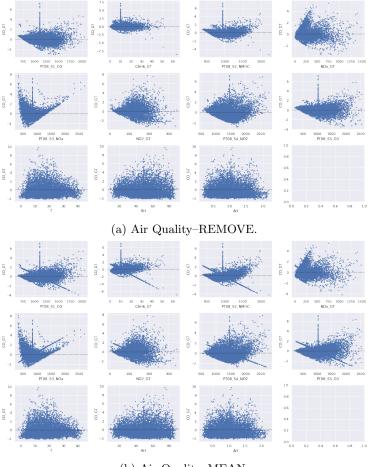
Hình 6: Regression plot.

3.4 Residual plot

Residual (Phần dư) được tính bằng hiệu số giữa giá trị kỳ vọng và giá trị thực tế của biến phụ thuộc. Giá trị kỳ vọng được tính bằng cách thay thế các giá trị khác nhau của biến độc lập trong phương trình hồi quy đã phát triển.

$$residual = y_i - \hat{y}_i \tag{1}$$

Residual plot là biểu đồ được sử dụng để kiểm xem các giả định được đưa ra trong phân tích hồi quy có đúng hay không. Nó là một đồ thị được vẽ giữa các phần dư của một mô hình hồi quy cụ thể và biến độc lập. Hình 7 trình bày residual plot của thuộc tính CO_GT với các thuộc tính khác.

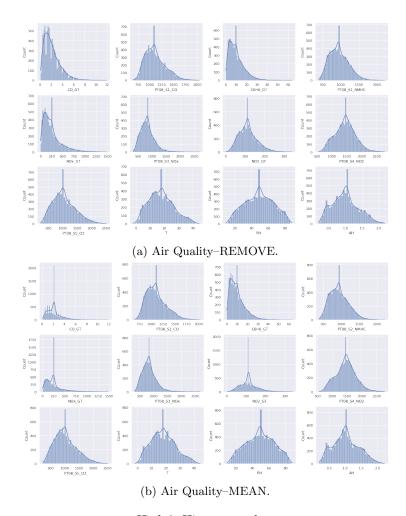


(b) Air Quality-MEAN.

Hình 7: Residual plot.

3.5 Histogram plot

Histogram là một dạng biểu đồ biểu diễn phân phối tần suất của một biến, thấy bằng hình ảnh sự thay đổi, biến động của một tập hợp các dữ liệu theo những hình dạng nhất định.



Hình 8: Histogram plot.

Hình 8a là histogram của bộ dữ liệu xử lý theo chiến lượt REMOVE. Ta thấy, hầu hết hình dạng biểu đồ của các thuộc tính đều bị lệch phải. Có các giá trị có số lượng cao hơn nhiều so với các giá trị còn lại là do quá trình xử lý missing values điền bằng mean.

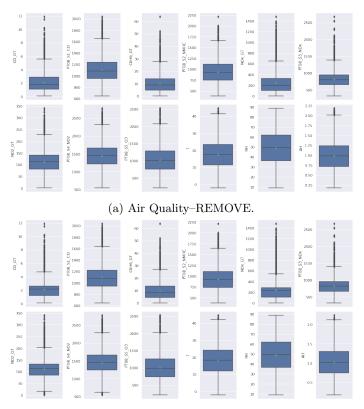
Hình 8b là histogram của bộ dữ liệu xử lý theo chiến lượt MEAN. Ta thấy, hầu hết hình dạng biểu đồ của các thuộc tính cũng đều bị lệch phải như Hình

8a. Vì xử lý missing values bằng cách điền giá trị mean nên số lượng các giá trị mean cao hơn nhiều so với bộ dữ liệu REMOVE, phân phối dữ liệu có những giá trị cao bất thường, điều này có thể ảnh hưởng không tốt đến khả năng dự đoán của mô hình.

Qua các biểu đồ phân phối dữ liệu ở Hình 8, ta có thể thấy được rằng cách xử lý missing values bằng cách điền các giá trị mean này vẫn chưa được tốt. Hướng giải quyết có thể sẽ mang lại kết quả tốt hơn là tính mean theo ngày/giờ để điền vào các missing value.

3.6 Box plot

Box plot (Biểu đồ hộp) là một loại biểu đồ thể hiện các khuôn hình của dữ liệu định tính, là biểu đồ diễn tả 5 vị trí phân bố của dữ liệu, đó là: giá trị nhỏ nhất (min), tứ phân vị thứ nhất (Q1), trung vị (median), tứ phân vị thứ 3 (Q3) và giá trị lớn nhất (max) [4].



(b) Air Quality-MEAN.

Hình 9: Box plot.

Box plot giúp biểu diễn các đại lượng quan trọng của dãy số như giá trị nhỏ nhất (min), giá trị lớn nhất (max), tứ phân vị (quartile) ⁵, khoảng biến thiên tứ phân vị (Interquartile Range) một cách trực quan, dễ hiểu.

Hình 9 Box plot của 2 bộ dữ liệu REMOVE và MEAN. Ta thấy, hầu hết các thuộc tính đều có outlier ⁶ (trừ thuộc tính RH). Trong đó các thuộc tính CO_GT, PT08_S1_CO, C6H6_GT, NOx_GT, PT08_S3_NOx, NO2_GT có số lượng outlier lớn (nhiều).

4 Hướng Tiếp Cận

Từ bộ dữ liệu Air Quality gốc, sau quá trình xử lý missing values ta thu được 2 bộ dữ liệu mới là REMOVE và MEAN. Qua quá trình phân tích ANOVA chúng tôi chọn được các biến đơn thuộc tính và xét sự tương tác 2 thuộc tính của tất cả các thuộc tính có ảnh hưởng lớn đến mô hình hồi quy. Trước khi huấn luyện mô hình hồi quy, chúng tôi tiến hành chuẩn hóa dữ liệu áp dụng kỹ thuật Feature Scaling là Standardization (được trình bày rõ hơn trong Phần 4.1). Để tạo ra mô hình hồi quy cho bài toán dự đoán nồng độ CO trong không khí, chúng tôi tiến hành xây dựng các mô hình Machine Learning (Máy Học) và Deep Learning (Học Sâu) như: Linear Regression, Decision Tree Regression, Random Forest Regression, Support Vector Machine, Neural Network. Để đánh giá mô hình chúng tôi sử dụng 4 độ đo chính là: R-Squared, Mean Squared Error, Root Mean Squared Error, Mean Absolute Error (chi tiết Phần 4.7).

4.1 Feature Scaling

Chuẩn hóa dữ liệu là một khái niệm chung đề cập đến hành động chuyển đổi các giá trị ban đầu của tập dữ liệu thành các giá trị mới. Các giá trị mới thường được mã hóa liên quan đến chính tập dữ liệu và được chia tỷ lệ theo một cách nào đó.

Data standardization là một loại kỹ thuật chuẩn hóa cụ thể. Nó đôi khi được gọi là z-score normalization. z-score còn gọi là điểm tiêu chuẩn, là giá trị được biến đổi cho mỗi điểm dữ liệu. Để chuẩn hóa tập dữ liệu bằng cách sử dụng standardization, chúng ta lấy mọi giá trị x_i bên trong tập dữ liệu và biến đổi nó thành giá trị z_i tương ứng bằng công thức sau:

$$z_i = \frac{x_i - \mu_k}{\sigma_k} \tag{2}$$

Trong đó: μ_k và σ_k lần lượt là trung bình và độ lệch chuẩn của từng thuộc tính thứ k. Quá trình standardization này chuyển giá trị trung bình của tập dữ liêu thành 0 và đô lệch chuẩn của nó thành 1.

⁵ Tứ phân vị là đại lượng mô tả sự phân bố và sự phân tán của tập dữ liệu. Tứ phân vị có 3 giá trị, đó là tứ phân vị thứ nhất, thứ nhì, và thứ ba. 3 giá trị này chia một tập hợp dữ liệu (đã sắp xếp dữ liệu theo trật từ từ bé đến lớn) thành 4 phần có số lượng quan sát đều nhau.

Outlier (Ngoại lệ) là điểm dữ liệu khác biệt đáng kể so với các điểm dữ liệu khác trong tập dữ liêu.

4.2 Linear Regression

Hồi Quy Tuyến Tính (Linear Regression) là một phương pháp phân tích quan hệ giữa biến phụ thuộc Y với một hay nhiều biến độc lập X. Mô hình hóa sử dụng hàm tuyến tính (bậc 1). Các tham số của mô hình (hay hàm số) được ước lượng từ dữ liệu. Hồi quy tuyến tính được sử dụng rộng rãi trong thực tế do tính chất đơn giản hóa của hồi quy. Nó cũng dễ ước lượng. Phương trình hồi quy tuyến tính có dạng như sau:

$$y = w_0 + w_1 \times x_1 + w_2 \times x_2 \dots + w_n \times x_n \tag{3}$$

Trong đó: y là biến phụ thuộc, $x_1, x_2, \ldots x_n$ là các biến độc lập, $w_0, w_1, w_2, \ldots w_n$ là các hệ số (tham số) của mô hình. Bài toán đi tìm các hệ số tối ưu $\{w_0, w_1, w_2, \ldots w_n\}$ chính vì vậy được gọi là bài toán Linear Regression.

4.3 Decision Tree Regression

Trong lĩnh vực máy học, *cây quyết định (Decision Tree)* là một kiểu mô hình dự báo (predictive model), nghĩa là một ánh xạ từ các quan sát về một sự vật/hiện tượng tới các kết luận về giá trị mục tiêu của sự vật/hiện tượng. Mỗi một nút trong (internal node) tương ứng với một biến; đường nối giữa nó với nút con của nó thể hiện một giá trị cụ thể cho biến đó. Mỗi nút lá đại diện cho giá trị dự đoán của biến mục tiêu, cho trước các giá trị của các biến được biểu diễn bởi đường đi từ nút gốc tới nút lá đó. Kỹ thuật học máy dùng trong cây quyết định được gọi là học bằng cây quyết định, hay chỉ gọi với cái tên ngắn gọn là cây quyết định [5].

Dữ liệu được cho dưới dạng các bản ghi có dạng:

$$(x,y) = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_k, y)$$

Biến phụ thuộc y là biến mà chúng ta cần tìm hiểu, phân loại hay dự đoán. x_1, x_2, x_3, \ldots là các biến sẽ giúp ta thực hiện công việc đó.

Cây hồi quy (Regression tree) ước lượng các hàm giá có giá trị là số thực thay vì được sử dụng cho các nhiệm vụ phân loại. (ví dụ: ước tính giá một ngôi nhà hoặc khoảng thời gian một bệnh nhân nằm viện)

4.4 Random Forest Regression

Rừng ngẫu nhiên (Random forests) hoặc rừng quyết định ngẫu nhiên (random decision forests) là một phương pháp học tập tổng hợp để phân loại (classification), hồi quy (regression) và các tác vụ khác hoạt động bằng cách xây dựng vô số cây quyết định tại thời điểm huấn luyện. Kết quả đầu ra của mô hình Random Forest được tổng hợp từ kết quả của các cây quyết định mà nó tạo ra. Đối với các tác vụ hồi quy, giá trị trung bình hoặc dự đoán trung bình của các cây riêng lẻ được trả về. Để hiểu rõ hơn về thuật toán Rừng ngẫu nhiên, hãy cùng tìm hiểu các bước sau:

- Bước 1: Chọn số lượng cây quyết định muốn tạo, gọi là n.
- Bước 2: Xây dựng n cây quyết định, với mỗi cây:
 - Bước 2.1: Chọn K điểm dữ liệu ngẫu nhiên trong tập dữ liệu.
 - Bước 2.2: Xây dựng cây quyết định dựa trên K điểm dữ liệu được chọn.
- Bước 3: Đối với một điểm dữ liệu mới, ta thực hiện dự đoán trên tất cả cây quyết định xây dựng được. Kết quả đầu ra của điểm dữ liệu này có thể được lấy là trung bình cộng dự đoán của tất cả các cây quyết định.

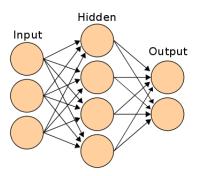
4.5 Support Vector Regression

Support Vector Machine (SVM) là một khái niệm trong thống kê và khoa học máy tính cho một tập hợp các phương pháp học có giám sát liên quan đến nhau để phân loại và phân tích hồi quy. SVM dạng chuẩn nhận dữ liệu vào và phân loại chúng vào hai lớp khác nhau. Do đó SVM là một thuật toán phân loại nhị phân. Với một bộ các ví dụ luyện tập thuộc hai thể loại cho trước, thuật toán luyện tập SVM xây dựng một mô hình SVM để phân loại các ví dụ khác vào hai thể loại đó. Một mô hình SVM là một cách biểu diễn các điểm trong không gian và lựa chọn ranh giới giữa hai thể loại sao cho khoảng cách từ các ví dụ luyện tập tới ranh giới là xa nhất có thể. Các ví dụ mới cũng được biểu diễn trong cùng một không gian và được thuật toán dự đoán thuộc một trong hai thể loại tùy vào ví dụ đó nằm ở phía nào của ranh giới [6].

Support Vector Regression (SVR) là một thuật toán Regression (hồi quy) dựa trên SVM. Thuật toán SVR (hay SVM) sẽ tìm một số vector đặc biệt (gọi là support vectors). Mô hình dự đoán kết quả đầu ra của những điểm dữ liệu mới dưa trên các vector đặc biệt này.

4.6 Artificial Neural Network

Mạng neural nhân tạo (Artificial Neural Network – ANN) hay thường gọi ngắn gọn là mạng neural (neural network - NN) là một mô hình toán học hay mô hình tính toán được xây dựng dựa trên các mạng neural sinh học. Nó gồm có một nhóm các neural nhân tạo (nút) nối với nhau, và xử lý thông tin bằng cách truyền theo các kết nối và tính giá trị mới tại các nút (cách tiếp cận connectionism đối với tính toán). Trong nhiều trường hợp, mạng neural nhân tạo là một hệ thống thích ứng (adaptive system) tự thay đổi cấu trúc của mình dựa trên các thông tin bên ngoài hay bên trong chảy qua mạng trong quá trình học. Trong thực tế sử dụng, nhiều mạng neural là các công cụ mô hình hóa dữ liệu thống kê phi tuyến. Chúng có thể được dùng để mô hình hóa các mối quan hệ phức tạp giữa dữ liêu vào và kết quả hoặc để tìm kiếm các dang/mẫu trong dữ liêu [7].



Hình 10: Kiến trúc ANN

Các lớp trong một Neural Network:

- Input layer: Nhận dữ liệu đầu vào.
- Kết nối giữa các layer với nhau, gồm: input layer, các lớp hiden layer khác và output layer.
- Output layer: Đưa ra kết quả từ dữ liệu đầu vào. Dữ liệu kết quả có thể là:
 - Label: dạng categorical đối với bài toán phân lớp (classification).
 - Value: dạng numeric đối với bài toán hồi quy (regression) hay xếp hạng (ranking).

4.7 Độ đo đánh giá

R-Squared Trong thống kê, hệ số xác định, được ký hiệu là R^2 hoặc r^2 và được gọi là 'R squared (R bình phương)' là tỷ lệ của phương sai trong biến phụ thuộc có thể dự đoán được từ (các) biến độc lập. Nó là một thống kê được sử dụng trong bối cảnh của các mô hình thống kê có mục đích chính là dự đoán các kết quả trong tương lai hoặc kiểm tra các giả thuyết, trên cơ sở các thông tin liên quan khác. Nó cung cấp một thước đo về mức độ nhân rộng của các kết quả quan sát được của mô hình, dựa trên tỷ lệ của tổng biến động của các kết quả được mô hình giải thích [8].

Cho một bộ dữ liệu có n giá trị y_1, y_2, \ldots, y_n (được gọi chung là y_i hoặc dưới dạng vecto $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \ldots, y_n]^T$), mỗi giá trị được liên kết với một giá trị được điều chỉnh (hoặc được mô hình hóa hoặc được dự đoán) f_1, f_2, \ldots, f_n (được gọi là f_i , hoặc đôi khi là $\hat{y_i}$, như một vecto \mathbf{f}).

Giá trị trung bình của dữ liệu quan sát:

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i \tag{4}$$

Hàm đánh giá \mathbb{R}^2 được định nghĩa là:

$$R^{2} = 1 - \frac{SSE_{model}}{SSE_{baseline}} = 1 - \frac{\sum_{i} (y_{i} - \hat{y}_{i})^{2}}{\sum_{i} (y_{i} - \bar{y})^{2}}$$
 (5)

Trong đó:

- $-SSE_{model}$ là giá trị hàm lỗi Squared Sum của tập dữ liệu khi đánh giá trên mô hình đang xét.
- $-\ SSE_{baseline}$ là giá trị hàm lỗi Squared Sum của tập dữ liệu khi đánh giá trên mô hình baseline⁷ (đường cơ sở).

Giá trị của hệ số R^2 luôn nằm trong đoạn $(-\infty, 1]$:

- Nếu $R^2 < 0$: Mô hình tệ hơn mô hình đường cơ sở.
- Nếu $R^2 = 0$: Mô hình giống như mô hình cơ sở. Nếu $R^2 = 0$: Mô hình chính xác tuyệt đối.

 R^2 càng lớn (càng gần 1) thì độ chính xác của mô hình với tập dữ liệu đang xét càng cao. Một mô hình được xem là tốt nếu $R^2 > 0.8$.

Nhược điểm:

- Khi sử dung hàm đánh giá R Squared để so sánh hai mô hình với số lương đặc trung đầu vào khác nhau, thì mô hình với số lương đặc trung đầu vào lớn hơn (gần như luôn luôn) cho giá trị R Squared lớn hơn. Vì vậy, hàm đánh giá R squared sẽ (gần như luôn luôn) nói rằng, mô hình nhân nhiều đặc trưng đầu vào hơn là tốt hơn, cho dù có một số đặc trưng không tương quan với kết quả đầu ra.
- Khi dữ liệu quá ít, giá trị của hàm R Squared sẽ không ổn định và không đáng tin cậy.

Mean Squared Error (MSE) Trong thống kê học, sai số toàn phương trung bình, viết tắt MSE (Mean squared error) của một phép ước lượng là trung bình của bình phương các sai số, tức là sự khác biệt giữa các ước lượng và những gì được đánh giá. MSE là một hàm rủi ro, tương ứng với giá trị kỳ vọng của sự mất mát sai số bình phương hoặc mất mát bậc hai. Sự khác biệt xảy ra do ngẫu nhiên, hoặc vì các ước lượng không tính đến thông tin có thể cho ra một ước tính chính xác hơn. MSE đánh giá chất lượng của một ước lượng (ví dụ, một hàm toán học lập bản đồ mẫu dữ liệu của một tham số của dân số từ đó các dữ liệu được lấy mẫu) hoặc một yếu tố dự báo (ví dụ, một bản đồ chức năng có số liệu vào tùy ý để một mẫu của các giá trị của một số biến ngẫu nhiên). Định nghĩa của một MSE khác với những gì tương ứng cho dù là một trong những mô tả một ước lượng, hay một yếu tố dư báo [9].

Nếu \hat{Y} là một vector của n giá trị dự báo, và Y là vector các giá trị quan sát được của biến dư đoán, thì MSE của phép dư báo có thể ước lượng theo công thức:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \hat{Y}_i)^2$$
 (6)

Tức là MSE là trung bình $(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n)$ của bình phương các sai số $((Y_i - \hat{Y})^2)$. Đây là định lượng dễ dàng tính được cho một mẫu cụ thể (phụ thuộc mẫu).

 $^{^7}$ Mô hình này chỉ dự đoán một kết quả đầu ra duy nhất đó cho mọi điểm dữ liệu đầu vào, đó là giá trị trung bình của tất cả các kết quả đầu ra trong tập dữ liệu.

Root Mean Squared Error (RMSE) Là một biện pháp thường được sử dụng trong những khác biệt giữa các giá trị (các giá trị mẫu hoặc tổng thể) được dự đoán bởi một mô hình hay một ước lượng và các giá trị quan sát được. RMSE đại diện cho căn bậc hai của thời điểm mẫu thứ hai về sự khác biệt giữa các giá trị dự đoán và giá trị quan sát hoặc giá trị trung bình bậc hai của những khác biệt này. Các độ lệch này được gọi là phần dư khi các phép tính được thực hiện trên mẫu dữ liệu được sử dụng để ước tính và được gọi là lỗi (hoặc lỗi dự đoán) khi tính toán ngoài mẫu. RMSE phục vụ để tổng hợp cường độ của các lỗi trong các dự đoán trong nhiều thời điểm khác nhau thành một thước đo duy nhất về sức mạnh dự đoán. RMSE là thước đo độ chính xác, để so sánh các lỗi dự báo của các mô hình khác nhau cho một tập dữ liệu cụ thể chứ không phải giữa các bô dữ liêu, vì nó phu thuộc vào quy mô [10].

RMSE được tính như sau:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$$
 (7)

Trong đó: n là số lượng điểm dữ liệu trong tập dữ liệu, y_i là kết quả thực của điểm dữ liệu thứ i, $\hat{y_i}$ là kết quả dự đoán cởi mô hình của điểm dữ liệu thứ i.

RMSE được xem như là độ sai lệch trung bình giữa đầu ra dự đoán với đầu ra thực. RMSE có giá trị trong khoảng $[0, +\infty)$:

- RMSE = 0: Mô hình chính xác tuyệt đối.
- RMSE càng nhỏ, độ chính xác của mô hình càng cao.

RMSE thường được sử dụng nhiều vì: không phụ thuộc vào số lượng điểm dữ liệu và cùng đơn vị với kết quả đầu ra. Nhược điểm: Phụ thuộc vào miền giá trị đầu ra của dữ liệu.

Mean Absolute Error (MAE) Trong thống kê, MAE là một phương pháp đo lường sự khác biệt giữa hai biến liên tục. Giả sử rằng X và Y là hai biến liên tục thể hiện kết quả dự đoán của mô hình và kết quả thực tế. MAE được tính bằng tổng sai số tuyệt đối chia cho cỡ mẫu [11]:

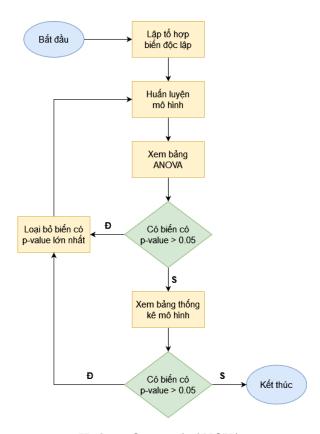
$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^{n} |y_i - x_i|}{n} = \frac{\sum_{i=1}^{n} |e_i|}{n}$$
 (8)

Do đó, nó là một trung bình cộng của các sai số tuyệt đối $|e_i| = |y_i - x_i|$. MAE sử dụng cùng thang đo với dữ liệu được đo. Đây được gọi là thước đo độ chính xác phụ thuộc vào thang đo và do đó không thể được sử dụng để so sánh giữa các chuỗi sử dụng các thang đo khác nhau. Độ đo này thường được sử dụng để đánh giá sự sai khác giữa mô hình dự đoán và tập dữ liệu testing trong các bài toán hồi quy. Chỉ số này càng nhỏ thì mô hình học máy càng chính xác.

5 Phân Tích ANOVA

Đối với từng bộ dữ liệu, chúng tôi tiến hành xây dựng và chọn lọc trên 2 loại mô hình:

- Mô hình 1: Áp dụng quy trình ANOVA (Hình 11) để loại bỏ các thuộc tính ít ảnh hưởng đến mô hình (p-value>0.05).
- Mô hình 2: Xét tương tác 2 thuộc tính của tất cả các thuộc tính trong bộ dữ liệu và tiến hành quy trình ANOVA (Hình 11) để loại bỏ các đơn thuộc tính và các thuộc tính tương tác ít ảnh hưởng đến mô hình (p-value>0.05).



Hình 11: Quy trình ANOVA.

Quy trình xây dựng và chọc lọc các thuộc tính có ý nghĩa theo các bước sau:

- Bước 1: Lập tổ hợp thuộc tính (biến độc lập).
- Bước 2: Khớp mô hình hồi quy với tổ hợp thuộc tính đã xác định.
- Bước 3: Nếu có thuộc tính có p-value>0.05 trong bảng ANOVA, thì ta sẽ loại bỏ thuộc tính có p-value cao nhất và quay lại Bước 2.

- Bước 4: Nếu có thuộc tính có p-value>0.05 trong bảng Fitting Linear Models, thì ta sẽ loại bỏ thuộc tính có p-value cao nhất và quay lại Bước 2.
- Bước 5: Khi không còn thuộc tính nào có p-value>0.05 thì ta sẽ kết thúc quy trình ANOVA và thu được tổ hợp các thuộc tính có ảnh hưởng lớn đến mô hình.

5.1 Bộ dữ liệu Air Quality-REMOVE.

ANOVA đơn thuộc tính Thực hiện phân tích ANOVA với tất cả các thuộc tính của bô dữ liêu.

```
Df Sum Sq Mean Sq
PT08_S1_C0
C6H6_GT
                                  6980.888
                                    64.576 1.07e-15 ***
PT08_S2_NMHC
NOx_GT
PT08_S3_N0x
                                   184.058
NO2_GT
                      40
                              40
                                   166.288
PT08_S4_N02
                                    118.545
PT08_S5_03
                                   123.125
                              30
                                   124.825
RH
                                    154.972
                                      3.013
                                              0.0827 .
Residuals
Signif. codes: 0 '***, 0.001 '**, 0.01 '*, 0.05 '., 0.1 ', 1
```

Hình 12: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 1.

 \mathring{O} lần đầu tiên thực hiện phân tích ANOVA, có duy nhất 1 thuộc tính có p-value>0.05 là AH với p-value=0.0827, do vậy ta sẽ loại bỏ thuộc tính này và tiếp tục thực hiện phân tích. Sau khi loại bỏ hết các thuộc tính có p-value>0.05 ta thu được kết quả như Hình 13.

```
PT08_S1_C0
                     11692
PT08_S2_NMHC
NO<sub>x</sub> GT
                                     3260.30
                                               < 2e-16
PT08_S3_NOx
                        44
                                       184.01
NO2 GT
                                       166.24
                                                  2e-16
PT08_S4_N02
                                       118.51
PT08_S5_03
                                       123.09
                                 30
                                       124.79
RH
                                       154.93
                                                < 2e-16
Residuals
```

Hình 13: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 1.

Sau đó, chúng tôi kiểm tra mức độ ý nghĩa của các hệ số theo bảng Fitting Linear Models và loại bỏ những thuộc tính không có quan hệ tuyến tính với CO GT.

```
lm(formula = CO_GT ~ PT08_S1_CO + C6H6_GT + PT08_S2_NMHC + NOx_GT +
    PT08_S3_NOx + N02_GT + PT08_S4_N02 + PT08_S5_03 + T + RH,
    data = data)
Residuals:
 -5.3698 -0.1946 0.0124 0.1918 4.3029
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
             -1.318e+00 1.397e-01 -9.437 < 2e-16 ***
1.371e-03 7.355e-05 18.642 < 2e-16 ***
(Intercept)
PT08_S1_C0
C6H6_GT 8.795e-02 4.928e-03 17.846 < 2e-16 ***
PT08_S2_NMHC -7.818e-05 1.636e-04 -0.478 0.632713
NOx_GT
               2.408e-03 5.951e-05 40.467 < 2e-16 ***
              1.573e-04 4.734e-05
                                       3.322 0.000897 ***
PT08_S3_NOx
NO2 GT
PT08_S4_N02
PT08_S5_03
              -2.692e-02 1.610e-03 -16.721 < 2e-16 ***
              -8.410e-03 6.757e-04 -12.447 < 2e-16 ***
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.4894 on 7663 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.8867,
                                 Adjusted R-squared: 0.8866
```

Hình 14: Bảng Fitting Linear Models các thuộc tính mô hình 1.

Hình 14 ta thấy có 1 thuộc tính có p-value>0.05, do vậy ta sẽ loại bỏ thuộc tính này và thực hiện lại phân tích ANOVA. Kết quả thu được như Hình 15.

Hình 15: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 1.

Ta tiếp tục quay lại kiểm tra mức độ ý nghĩa của các hệ số theo bảng Fitting Linear Models. Vì không còn thuộc tính nào có p-value>0.05 nữa (Hình 16). Nên ta sẽ kết thúc quá trình phân tích ANOVA.

Hình 16: Bảng Fitting Linear Models các thuộc tính mô hình 1.

Mô hình hồi quy có dạng:

```
 \begin{split} CO\_GT &= -1.368e^{+00} + 1.370e^{-03} \times PT08\_S1\_CO \\ &+ 8.601e^{-02} \times C6H6\_GT + 2.409e^{-03} \times NOx\_GT \\ &+ 1.681e^{-04} \times PT08\_S3\_NOx + 2.502e^{-03} \times NO2\_GT \\ &+ 1.048e^{-03} \times PT08\_S4\_NO2 - 5.286e^{-04} \times PT08\_S5\_O3 \\ &- 2.687e^{-02} \times T - 8.331e^{-03} \times RH \end{split}
```

ANOVA tương tác 2 thuộc tính Thực hiện phân tích ANOVA với tất cả các thuộc tính và kết hợp với các tương tác 2 thuộc tính của tất cả các thuộc tính trong bộ dữ liệu. Kết quả thực hiện ANOVA lần đầu tiên được thể hiện ở Hình 17.

PT08_S1_C0	Df 1	Sum Sq 11692	Mean Sq	F value 60183.325	Pr(>F) < 2e-16 ***
C6H6_GT		1672	1672	8604.692	< 2e-16 ***
PT08_S2_NMHC				79.597	< 2e-16 ***
NOX_GT	1 1	781 44	781 44	4019.718	< 2e-16 ***
PT08_S3_N0x N02_GT	1	44	44	226.871 204.967	< 2e-16 *** < 2e-16 ***
PT08_S4_N02		28	28	146.119	< 2e-16 ***
PT08_S5_03		29	29	151.765	< 2e-16 ***
T RH	1 1	30 37	30 37	153.860 191.019	< 2e-16 *** < 2e-16 ***
AH					0.054011 .
I(PT08_S1_CO * C6H6_GT)				32.460	1.26e-08 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S2_NMHC) I(PT08_S1_CO * NOx_GT)		2	2		0.000947 ***
I(PT08_S1_CO * NOx_GT)	1 1	39 5	39 5	199.233 27 ASQ	< 2e-16 *** 1.99e-07 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S3_NOX) I(PT08_S1_CO * N02_GT) I(PT08_S1_CO * PT08_S4_NO2)		18	18	93.315	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S4_NO2)		53	53	274.135	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S5_03) I(PT08_S1_CO * T)					0.000419 *** 0.003361 **
I(PT08_S1_CO * RH)	1	0	9		0.883590
I(PT08_S1_CO * AH)					0.488533
I(C6H6_GT * PT08_S2_NMHC)		30	30	152.132	< 2e-16 ***
I(C6H6_GT * NOx_GT) I(C6H6_GT * PT08_S3_NOx)					0.858714 0.045747 *
I(C6H6 GT * NO2 GT)					0.001974 **
T(C6H6 GT * PT08 S4 NO2)		11	11	58.721	2.04e-14 ***
I(C6H6_GT * PT08_S5_03) I(C6H6_GT * T)		10	10		2.25e-13 ***
I(C6H6_GT * RH)	1 1		9 4		0.139116 1.19e-05 ***
I(C6H6 GT * AH)					1.11e-06 ***
I(PT08_S2_NMHC * NOx_GT)				27.544	1.58e-07 ***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S3_NOx) I(PT08_S2_NMHC * NO2_GT)		0	0		0.259766
I(PT08_S2_NMHC * NO2_GT) I(PT08_S2_NMHC * PT08_S4_NO2)		29 5	29 5		< 2e-16 *** 7.86e-07 ***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S5_03)					0.001136 **
I(PT08_S2_NMHC * T)					8.09e-06 ***
I(PT08_S2_NMHC * RH) I(PT08_S2_NMHC * AH)			0 3		0.220447 3.32e-05 ***
I(NOx GT * PT08 S3 NOx)					0.040330 *
I(NOx_GT * NO2_GT) I(NOx_GT * PT08_S4_NO2)		20	20	104.257	< 2e-16 ***
I(NOx_GT * PT08_S4_N02)		32	32	167.267	< 2e-16 ***
I(NOx_GT * PT08_S5_03) I(N0x_GT * T)		1 0	1 0		0.065161 . 0.436145
I(NOx_GT * RH)					5.83e-05 ***
I(NOx_GT * AH)					0.015902 *
I(PT08_S3_NOx * NO2_GT)					0.041641 * 0.005065 **
I(PT08_S3_NOx * PT08_S4_NO2) I(PT08_S3_NOx * PT08_S5_O3)		2 1	2 1		0.005065 ** 0.012319 *
I(PT08_S3_N0x * T)					4.79e-07 ***
I(PT08_S3_NOx * RH)					0.865580
I(PT08_S3_NOx * AH) I(NO2_GT * PT08_S4_NO2)		2 12	2 12		0.000343 ***
I(NO2_GT * PT08_S4_NO2) I(NO2_GT * PT08_S5_O3)		1	1		2.04e-15 *** 0.036442 *
I(NO2_GT * T)					0.022475 *
I(NO2_GT * RH)					9.68e-09 ***
I(NO2_GT * AH) I(PT08_S4_NO2 * PT08_S5_O3)		0 18	0 18		0.654343 < 2e-16 ***
I(PT08_54_NO2 * T)		2	2		0.002011 **
I(PT08_S4_NO2 * RH)					0.602290
I(PT08_S4_N02 * AH)					0.006261 **
I(PT08_S5_03 * T) I(PT08_S5_03 * RH)	1	0 0	0 0		0.830234 0.215878
I(PT08_S5_03 * AH)		1	1		0.008983 **
I(T * RH)				0.179	0.672363
I(T * AH)					7.23e-06 ***
I(RH * AH) Residuals	1 7607	0 1478	0 0	2.251	0.133551
Signif. codes: 0 '*** 0.001	(**)	0.01 '	0.05	. 0.1	1

Hình 17: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Ta có thể thấy rằng có rất nhiều thuộc tính có p-value>0.05, vì vậy ta cần thực hiện ANOVA nhiều lần để tìm ra các thuộc tính có ý nghĩa. Sau khoảng 30 lần thực hiện ANOVA để loại bỏ từng thuộc tính có p-value>0.05, ta thu được kết quả như Hình 18.

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
PT08_S1_C0		11692	11692	58388.607	< 2e-16 ***
C6H6_GT		1672	1672	8348.092	< 2e-16 ***
PT08_S2_NMHC				77.223	< 2e-16 ***
NOx_GT		781	781	3899.846	< 2e-16 ***
PT08_S3_NOx		44	44	220.106	< 2e-16 ***
NO2_GT		40	40	198.855	< 2e-16 ***
PT08_S4_N02		28	28	141.762	< 2e-16 ***
PT08_S5_03				147.239	< 2e-16 ***
Т		30	30	149.272	< 2e-16 ***
RH		37	37	185.323	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * C6H6_GT)				31.242	2.36e-08 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S2_NMHC)				11.841	0.000583 ***
I(PT08_S1_CO * NOx_GT)		37	37	184.943	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S3_NOx)				29.328	6.30e-08 ***
I(PT08_S1_CO * NO2_GT)			19	94.298	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S4_NO2)		52	52	260.034	< 2e-16 ***
I(PT08_S1_CO * PT08_S5_O3)				12.773	0.000354 ***
I(PT08_S1_CO * T)				12.860	0.000338 ***
I(C6H6_GT * PT08_S2_NMHC)		30	30	147.690	< 2e-16 ***
I(C6H6_GT * NO2_GT)				5.319	0.021116 *
I(C6H6_GT * PT08_S4_NO2)		13	13	64.174	1.31e-15 ***
I(C6H6_GT * PT08_S5_O3)		10	10	51.350	8.45e-13 ***
I(PT08_S2_NMHC * NO2_GT)				30.860	2.87e-08 ***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S4_NO2)				18.517	1.70e-05 ***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S5_03)				19.759	8.91e-06 ***
I(NOx_GT * PT08_S3_NOx)				13.056	0.000304 ***
I(NOx_GT * NO2_GT)		22	22	107.486	< 2e-16 ***
I(NOx_GT * PT08_S4_NO2)		30	30	151.411	< 2e-16 ***
I(NOx_GT * PT08_S5_03)				34.168	5.26e-09 ***
I(NOx_GT * RH)				14.481	0.000143 ***
I(PT08_S3_NOx * PT08_S4_NO2)				10.834	0.001001 **
I(PT08_S3_NOx * PT08_S5_O3)				13.128	0.000293 ***
I(NO2_GT * PT08_S4_NO2)		18	18	89.646	< 2e-16 ***
I(NO2_GT * T)				16.061	6.19e-05 ***
I(NO2_GT * RH)				32.001	1.60e-08 ***
I(PT08_S4_NO2 * PT08_S5_O3)		14	14	71.942	< 2e-16 ***
Residuals	7637	1529			
Signif. codes: 0 '***' 0.001		0.01	0.05	'.' 0.1 '	

Hình 18: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Sau đó, chúng tôi kiểm tra mức độ ý nghĩa của các hệ số theo bảng Fitting Linear Models và loại bỏ những thuộc tính không có quan hệ tuyến tính với CO GT.

Hình 19a ta thấy có rất thuộc tính đơn và thuộc tính tương tác có p-value>0.05, do vậy ta sẽ loại bỏ thuộc tính có p-value cao nhất và thực hiện lại phân tích ANOVA. Kết quả thu được như Hình 19b.

Coefficients:					
(Intercept) PT08_51_CO C604_GT PT08_52_NM+C NOx_GT PT08_53_NOX NO2_GT PT08_53_NOX PT08_55_03 T					
(Intercept)	1.775e-01	8.332e-01			
PT08 S1 C0	-1.416e-03	1.431e-03	-0.990	0.322424	
C6H6_GT	4.485e-02	3.640e-02		0.217935	
PT08 S2 NMHC	2.204e-03	1.048e-03 6.335e-04			
NOx GT	6.250e-05	6.335e-84	0.099	0.921409	
PT08 S3 NOx	-1.138e-03	3.021e-04		0.000168	
NO2_GT	-2.061e-02	2.809e-03		2.37e-13	
PT08 S4 NO2	3.362e-04	7.512e-04	0.448	0.654521	
PT08_S5_03	1.275e-03			0.099144	
т					
RH	5.697e-03	1.717e-03		0.000914	
I(PT08 S1 CO * C6H6 GT)	3.643e-05	5.210e-05	0.699	0.484474	
I(PT08 S1 CO * PT08 S2 NMHC)	-1.619e-06	1.756e-06	-0.922	0.356514	
I(PT08 S1 CO * NOx GT)		6.986e-07			
I(PT08_S1_CO * PT08_S3_NOx)	3.095e-06	5.378e-87		8.59e-89	
I(PT08 S1 CO * NO2 GT)	-1.747e-05	2.409e-06		4.48e-13	
I(PT08 S1 CO * PT08 S4 NO2)	1.509e-07	4.217e-07	0.358	0.720545	
I(PT08_S1_CO * PT08_S4_NO2) I(PT08_S1_CO * PT08_S5_O3)	2.663e-06	3.049e-07	8.733	< 2e-16	
I(PT08_S1_CO * T)	-2.162e-05		-3.453	0.000557	
I(C6H6 GT * PT08 S2 NMHC)	-1.106e-04	1.695e-05		7.28e-11	
I(C6H6 GT * NO2 GT)	-1.258e-03	1.486e-04	-8.472	< 2e-16	
	5.096e-05				
I(C6H6 GT * PT08 S5 03)	1.366e-04	3.036e-05	4.500	6.98e-86	
I(C6H6_GT * PT08_S5_03) I(PT08_S2_NMHC * N02_GT)	1.366e-04 3.434e-05	4.551e-06		5.05e-14	
I(PT08 S2 NMHC * PT08 S4 NO2)	3.503e-07	7.538e-07	0.465	0.642121	
I(PT08 S2 NMHC * PT08 S5 03)					
I(NOx GT * PT08 S3 NOx)	4.450e-07	3.460e-07	1.286	0.198497	
I(NOX GT * NOZ GT)	1.4226-85	8.699e-07	16.345	< 2e-16	
I(NOx_GT * NO2_GT) I(NOx_GT * PT08_S4_NO2) I(NOx_GT * PT08_S5_O3)		2.678e-07			
I(NOx_GT * PT08_S5_03)		3.288e-07			
I(NOx GT * RH)		3.217e-06			
I(PT08 S3 NOx * PT08 S4 NO2)	-1.211e-06	2.670e-07	-4.535	5.85e-86	
T(PTOR S3 NOx * PTOR S5 03)	-5.108e-07				
I(NO2_GT * PT08_S4_NO2)	1.848e-05				
I(NO2 GT * T)		4.182e-05			
T(NO2 GT * RH)	-8 739e-85	1 6130-85	-5 416	6 270-88	
I(PT08 S4 NO2 * PT08 S5 O3)	-1.947e-06	2.295e-07	-8.482	< 2e-16	
Signif. codes: 0 '*** 0.001					
Residual standard error: 0.44	75 on 7637 i	degrees of			
Multiple R-squared: 0.9856,		R-squared:	0.9052		
F-statistic: 2036 on 36 and	7637 DF, p				

	Df	Sum Sa	Mean Sa	F value	Pr(>F)	
PT08 51 CO				58396.178		
C6H6 GT				8349.175	< 2e-16	
PT08 S2 NMHC				77.233	< 2e-16	
PT08 S3 NOx				2.343	0.125924	
NO2 GT				2586.357	< 2e-16	
PT08 54 NO2				2.944	0.086215	
PT08 S5 03				11.388	0.000743	
т				299.412	< 2e-16	
RH				81.510	< 2e-16	
I(PT08 S1 CO * C6H6 GT)				146.971	< 2e-16	
I(PT08 S1 CO * PT08 S2 NMHC)				2,360	0.124532	
I(PT08 S1 CO * NOX GT)				1425.648	< 2e-16	
I(PT08 S1 CO * PT08 S3 NOx)				106.195	< 2e-16	
I(PT08 S1 CO * NO2 GT)				48.061	4.47e-12	
I(PT08 S1 CO * PT08 S4 NO2)				492.799	< 2e-16	
I(PT08 S1 CO * PT08 S5 O3)				1.479	0.223959	
I(PT08 S1 CO * T)				16.610	4.64e-05	
I(C6H6 GT * PT08 S2 NMHC)				159.489	< 2e-16	
I(C6H6 GT * NO2 GT)				3.919	0.047774	
I(C6H6 GT * PT08 S4 NO2)				18.911	1.39e-05	
I(C6H6 GT * PT08 S5 O3)				46.531	9.71e-12	
I(PT08 S2 NMHC * NO2 GT)				47.277	6.65e-12	
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S4_NO2)				20.843	5.06e-06	
I(PT08 S2 NMHC * PT08 S5 03)				2.973	0.084708	
I(NOx GT * PTØ8 S3 NOx)				325.033		
I(NOx GT * NO2 GT)				136.919	< 2e-16	
I(NOx GT * PTØ8 S4 NO2)				188.196	< 2e-16	
I(NOx_GT * PT08_S5_03)				35.642	2.48e-09	
I(NOx_GT * RH)					0.000399	
I(PT08_S3_NOx * PT08_S4_NO2)				7.849	0.005099	
I(PT08_S3_NOx * PT08_S5_O3)				25.745	3.99e-07	
I(NO2_GT * PTØ8_S4_NO2)				91.863		
I(NO2_GT * T)					8.48e-05	
I(NO2_GT * RH)					2.10e-09	
I(PT08_S4_NO2 * PT08_S5_O3)						
Residuals						
Signif. codes: 0 '***' 0.001	(**)	0.01	0.05	(.' 0.1 (1	

(a) Bång Fitting Linear Models

(b) Bảng ANOVA.

Hình 19: Bảng Fitting Linear Models và ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Tiếp tục thực hiện phân tích ANOVA đến khi loại bỏ hết các thuộc tính có p-value>0.05, ta thu được kết quả như Hình 20a. Sau đó, chúng tôi kiểm tra mức độ ý nghĩa của các hệ số theo bảng Fitting Linear Models và loại bỏ những thuộc tính không có quan hệ tuyến tính với CO_GT. Hình 20b ta thấy vẫn còn vài thuộc tính đơn và thuộc tính tương tác có p-value>0.05, do vậy ta sẽ loại bỏ thuộc tính có p-value cao nhất và thực hiện lại phân tích ANOVA.

```
| Prior | Prio
```

```
(a) Bång ANOVA
```

	Estimate				
		4.273e-01		1.68e-09	
PT08_S1_CO	3.446e-03	7.573e-04		5.44e-86	
C6H6 GT	-2.913e-02	2.932e-02			
PT08_S2_NMHC	2.952e-03			5.28e-05	
NO2_GT					
PT08 S5 03	1.142e-03	2.520e-04		5.91e-06	
	1.919e-02				
	2.703e-03	1.628e-03		0.09688	
I(PT08_S1_CO * C6H6_GT)	8.576e-05				
I(PT08 S1 CO * PT08 S2 NMHC)	-1.179e-06	9.466e-07			
I(PT08_S1_CO * NOx_GT)	1.085e-06				
I(PT08 S1 CO * PT08 S3 NOx)	2.131e-08	1.490e-07		0.88626	
I(PT08 S1 CO * NO2 GT)	-1.156e-05	2.117e-06		4.98e-08	
I(PT08 S1 CO * PT08 S4 NO2)	-2.736e-07	3.133e-07			
I(PT08 S1 CO * T)	-2.518e-05	5.847e-06	-4.307	1.68e-05	
I(C6H6_GT * PT08_S2_NMHC)	-1.428e-04	1.607e-05	-8.889	< 2e-16	
I(C6H6 GT * NO2 GT)	-9.271e-04	1.270e-04		3.18e-13	
I(C6H6_GT * PT08_S4_NO2)	1.004e-04	1.371e-05		2.61e-13	
I(C6H6_GT * PT08_S5_03)		1.430e-05			
	2.136e-05			1.28e-08	
I(PT08 S2 NMHC * PT08 S4 NO2)	-9.772e-07	4.687e-07	-2.085		
I(NOx GT * PT08 S3 NOx)	1.112e-06	2.158e-07		2.65e-07	
I(NOx GT * NO2 GT)	1.442e-05	8.409e-07		< 2e-16	
I(NOx_GT * PT08_S4_NO2)	1.025e-06	2.586e-07		7.43e-05	
I(NOx_GT * PT08_S5_03)	-2.399e-06	3.045e-07	-7.878		
I(NOx GT * RH)	-8.766e-06	3.124e-06	-2.806	0.00503	
I(PT08 S3 NOx * PT08 S5 O3)	-1.351e-07	1.740e-07		0.43763	
I(NO2 GT * PT08 S4 NO2)	1.725e-05	1.628e-06	10.595	< 2e-16	
I(NO2 GT * T)	-1.748e-04	4.046e-05	-4.320	1.58e-05	
I(NO2_GT * RH)	-7.359e-05	1.537e-05		1.72e-06	
I(PT08_S4_NO2 * PT08_S5_03)					
Residual standard error: 0.452 Multiple R-squared: 0.9037.					

(b) Bång Fitting Linear Models.

Hình 20: Bảng Fitting Linear Models và ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Thực hiện lặp đi lặp lại quá trình trên nhiều lần, ta thu được kết quả cuối cùng được thể hiện ở Hình 21. Kết thúc quá trình phân tích ANOVA.

(a) Bång ANOVA

```
cal:
| In(Grmula = CO_GT - PT0E_S1_CO + PT0E_S2_WebC + M02_GT + PT0E_S5_G) + |
| In(Grmula = CO_GT - PT0E_S1_CO + PT0E_S2_WebC + M02_GT + PT0E_S5_G) + |
| In(Grmula = CO_GT - PT0E_S1_MO2) + |
| In(Grmula = CO_GT -
```

(b) Bång Fitting Linear Models.

Hình 21: Bảng Fitting Linear Models và ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Mô hình hồi quy có dạng:

```
CO\_GT = -8.659e^{-01} + 1.086e^{-03} \times PT08\_S1\_CO \\ + 1.422e^{-03} \times PT08\_S2\_NMHC - 1.044e^{-02} \times NO2\_GT \\ + 1.219e^{-03} \times PT08\_S5\_O3 \\ + 6.646e^{-05} \times I(PT08\_S1\_CO * C6H6\_GT) \\ - 2.660e^{-05} \times I(PT08\_S1\_CO * T) \\ - 6.240e^{-05} \times I(C6H6\_GT * PT08\_S2\_NMHC) \\ - 2.301e^{-04} \times I(C6H6\_GT * NO2\_GT) \\ + 5.755e^{-05} \times I(C6H6\_GT * PT08\_S4\_NO2) \\ + 2.138e^{-06} \times I(NOx\_GT * PT08\_S3\_NOx) \\ + 1.305e^{-05} \times I(NOx\_GT * NO2\_GT) \\ - 8.011e^{-07} \times I(NOx\_GT * PT08\_S5\_O3) \\ - 4.460e^{-07} \times I(PT08\_S3\_NOx * PT08\_S5\_O3) \\ + 9.659e^{-06} \times I(NO2\_GT * PT08\_S4\_NO2) \\ - 7.139e^{-05} \times I(NO2\_GT * RH) \\ - 8.390e^{-07} \times I(PT08\_S4\_NO2 * PT08\_S5\_O3)
```

5.2 Bộ dữ liệu Air Quality-MEAN.

ANOVA đơn thuộc tính Thực hiện phân tích ANOVA với tất cả các thuộc tính của bộ dữ liệu.

(a) Bảng ANOVA

(b) Bång Fitting Linear Models.

Hình 22: Bảng Fitting Linear Models và ANOVA các thuộc tính mô hình 1.

 \mathring{O} lần đầu tiên thực hiện phân tích ANOVA, không có thuộc tính nào có p-value>0.05 (Hình 22a). Do đó, ta sẽ thực hiện kiểm tra mức độ ý nghĩa của các hệ số theo bảng Fitting Linear Models (Hình 22b). Kết quả thu được là vẫn không có thuộc tính nào có p-value>0.05. Vậy, quá trình phân tích ANOVA không bỏ được thuộc tính nào, vì thế mô hình thu được là mô hình trên bộ dữ liệu gốc.

Mô hình hồi quy có dạng:

```
\begin{split} CO\_GT &= -8.667e^{-01} + 9.248e^{-04} \times PT08\_S1\_CO \\ &+ 7.125e^{-02} \times C6H6\_GT - 1.142e^{-03}PT08\_S2\_NMHC \\ &+ 3.257e^{-03} \times NOx\_GT + 1.624e^{-04} \times PT08\_S3\_NOx \\ &+ 3.007e^{-03} \times NO2\_GT + 1.511e^{-03} \times PT08\_S4\_NO2 \\ &- 3.533e^{-04} \times PT08\_S5\_O3 - 1.439e^{-02} \times T \\ &- 5.439e^{-03} \times RH - 2.256e^{-01} \times AH \end{split}
```

ANOVA tương tác 2 thuộc tính Thực hiện phân tích ANOVA với tất cả các thuộc tính và kết hợp với các tương tác 2 thuộc tính của tất cả các thuộc tính trong bộ dữ liệu. Kết quả thực hiện ANOVA lần đầu tiên được thể hiện ở Hình 23.

			Mean Sq	F value		
PT08_S1_C0		9695 1228	9695 1228	31846.132	< 2e-16 < 2e-16	***
C6H6_GT PT08_S2_NMHC	1	35	35	4034.238 116.220	< 2e-16	
NOX GT		1579	1579	5186.193	< 2e-16	***
PT08_S3_NOx		81	81	265.767	< 2e-16	***
NO2_GT		38	38	126.456	< 2e-16	***
PT08_S4_NO2		167	167	549.949	< 2e-16	***
PT08_S5_03 T	1 1	18 17	18 17		1.36e-14 1.76e-13	***
RH		48	48	158.085	< 2e-16	***
AH				23.197	1.49e-06	***
I(PT08_S1_CO * C6H6_GT)		13	13	44.236	3.08e-11	***
I(PT08_S1_C0 * PT08_S2_NMHC)					5.51e-06	***
I(PT08_S1_CO * NOx_GT)		0	0		0.753710	***
I(PT08_S1_CO * PT08_S3_NOx) I(PT08_S1_CO * NO2_GT)		40 16	40 16	130.241	< 2e-16 7.38e-13	***
I(PT08_S1_CO * PT08_S4_NO2)	1	58	58	191.522	< 2e-16	***
I(PT08_S1_CO * PT08_S5_03)					0.752875	
I(PT08_S1_C0 * T)					0.108092	
I(PT08_S1_CO * RH)		17	17		5.50e-14	***
I(PT08_S1_CO * AH) I(C6H6 GT * PT08 S2 NMHC)		3	3		0.003948	***
I(C6H6_GT * PT08_52_NMHC)		16 41	16 41	133.936	3.80e-13 < 2e-16	***
I(C6H6_GT * PT08_S3_NOx)	1	2	2		0.015313	*
I(C6H6_GT * NO2_GT)					2.78e-05	***
I(C6H6_GT * PT08_S4_NO2)				6.052	0.013908	*
I(C6H6_GT * PT08_S5_03)		43	43	140.136	< 2e-16	***
I(C6H6_GT * T)					0.003407	**
I(C6H6_GT * RH) I(C6H6_GT * AH)					0.004330 0.001289	**
I(PT08_S2_NMHC * NOx_GT)	1	13	13		1.35e-10	***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S3_NOx)					5.10e-05	***
I(PT08_S2_NMHC * NO2_GT)		20	20		6.05e-16	***
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S4_NO2)					0.636990	
I(PT08_S2_NMHC * PT08_S5_03) I(PT08 S2 NMHC * T)		1 0	1 0		0.079635 0.636673	•
I(PT08_52_NMHC * T) I(PT08_52_NMHC * RH)		9	0		0.801244	
I(PT08_S2_NMHC * AH)	1	2	2		0.016594	*
I(NOx_GT * PT08_S3_NOx)				2.603	0.106663	
I(NOx_GT * NO2_GT)					2.04e-06	***
I(NOx_GT * PT08_S4_N02)		64	64	209.802	< 2e-16	***
I(NOx_GT * PT08_55_03) I(NOx_GT * T)	1 1	1 0	1 0		0.063724 0.828803	•
I(NOX_GT * RH)		9	0		0.594534	
I(NOx_GT * AH)					0.001051	**
I(PT08_S3_NOx * NO2_GT)					0.000123	***
I(PT08_S3_N0x * PT08_S4_N02)					0.006630	**
I(PT08_S3_NOx * PT08_S5_03)			1 8		0.151712	***
I(PT08_S3_NOx * T) I(PT08_S3_NOx * RH)		3	3		3.14e-07 0.001910	**
I(PT08_S3_NOx * AH)						**
I(NO2_GT * PT08_S4_NO2)				3.426	0.064199	
I(NO2_GT * PT08_S5_03)					0.029619	*
I(NO2_GT * T)					0.735802	
I(NO2_GT * RH) I(NO2_GT * AH)	1 1	2 8	2 8		0.021244 1.43e-07	***
I(PT08_S4_N02 * PT08_S5_03)	1	23	23	75.106	< 2e-16	***
I(PT08_S4_N02 * T)					0.000208	***
I(PT08_S4_N02 * RH)					4.88e-06	***
I(PT08_S4_NO2 * AH)			2		0.011109	*
I(PT08_S5_03 * T)		9 9	9 9	1.007	0.315656	
I(PT08_S5_03 * RH) I(PT08_S5_03 * AH)		9	9		0.764871 0.375103	
I(T * RH)					0.159950	
I(T * AH)				20.325	6.61e-06	***
I(RH * AH)				0.215	0.642969	
Residuals	9290	2828				
 Signif. codes: 0 '***' 0.001	(**)	0 01 0	k) a ac	, , , , (
JIGHI 1. COGCS. 0 0.001		0.01	0.03	. 0.1		

Hình 23: Bảng ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Ta có thể thấy rằng có rất nhiều thuộc tính có p-value>0.05, vì vậy ta cần thực hiện ANOVA nhiều lần để tìm ra các thuộc tính có ý nghĩa. Thực hiện các bước tương tư như bộ dữ liệu ở Phần 5.1 ta thu được kết quả cuối cùng được thể hiện ở Hình 24.

```
DF Sum Sq Nean Sq F value Pr(F)

PT08, S1, CO 1 909 9095 30836.143 2 e-16 ***

C616. GT 1 1228 30806.294 < 2e-16 ***

PT08, S2, NPNC 1 35 35 112,534 2 e-16 ***

NOV_GT 1 135 35 112,534 2 e-16 ***

NOV_GT 1 137 35 35 112,534 2 e-16 ***

NOV_GT 1 138 31 257,338 2 e-16 ***

NOV_GT 1 1 38 38 122,445 2 e-16 ***

PT08, S3, NOX 1 1 81 81 257,338 2 e-16 ***

PT08, S4, NOZ 1 1 167 167 522,507 2 e-16 ***

PT08, S4, NOZ 1 1 167 167 522,507 2 e-16 ***

PT08, S5, CO **

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, UPHC) 1 5 5 15.509 7,022-0.6 ***

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, UPHC) 1 5 5 15.509 7,022-0.6 ***

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, UPHC) 1 12 12 39,343 3,772-10 ***

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, UPHC) 1 12 12 39,343 3,772-10 ***

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, UPHC) 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, WPHC) 1 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, WPHC) 1 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, WPHC) 1 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S1, CO ** PT08, S2, WPHC) 1 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S1, CO ** RH) 1 1 1 1 1,744 40,024 **

T(F708, S2, WPHC ** NOX, GT) 1 12 4 24 76,819 6 2-2-16 ***

T(F708, S2, WPHC ** NOX, GT) 1 39 39 124,815 2 e-16 ***

T(F708, S2, MPHC ** NOX, GT) 1 38 35 112,827 (2-2-16 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 6 6 71,586 2,779-65 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 18 18 5,588 5,780-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,780-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,780-14 ***

T(F708, S3, MOX ** HN) 1 1 8 5,588 5,880-14 ***

T(F708, S3, MOX ** H
```

(a) Bảng ANOVA

```
Call:

| Action | Act
```

(b) Bång Fitting Linear Models.

Hình 24: Bảng Fitting Linear Models và ANOVA các thuộc tính mô hình 2.

Mô hình hồi quy có dạng:

```
CO GT = 9.623e^{00} - 7.288e^{-03} \times PT08 S1 CO + 3.752e^{-01} \times C6H6 GT
          -8.954e^{-03} \times PT08 \ S2 \ NMHC + 1.034e^{-02} \times NOx \ GT
          -2.574e^{-03} \times PT08 \quad S3 \quad NOx - 2.486e^{-02} \times NO2 \quad GT
          -6.689e^{-04} \times PT08 \quad S4 \quad NO2 + 2.543e^{-04} \times PT08 \quad S5 \quad O3
          -3.138e^{-02} \times RH - 1.200e^{-04} \times I(PT08 \ S1 \ CO * C6H6 \ GT)
          +7.277e^{-06} \times I(PT08 \ S1 \ CO*PT08 \ S2 \ NMHC)
          +2.029e^{-06} \times I(PT08 \ S1 \ CO * PT08 \ S3 \ NOx)
          -1.216e^{-05} \times I(PT08 \ S1 \ CO*NO2 \ GT)
          +7.233e^{-07} \times I(PT08 \ S1 \ CO * PT08 \ S4 \ NO2)
          +2.166e^{-05} \times I(PT08 \ S1 \ CO*RH)
          -3.336e^{-04} \times I(PT08 \ S1 \ CO*AH)
          -1.243e^{-04} \times I(C6H6 \ GT * PT08 \ S2 \ NMHC)
          +4.390e^{-04} \times I(C6H6 \ GT * NOx \ GT)
          -8.913e^{-04} \times I(C6H6 \ GT*NO2 \ GT)
          -9.316e^{-04} \times I(C6H6 \ GT*RH)
          -1.836e^{-05} \times I(PT08 \ S2 \ NMHC * NOx \ GT)
          +5.127e^{-05} \times I(PT08 \ S2 \ NMHC*NO2 \ GT)
          +4.343e^{-06} \times I(NOx \ GT*PT08 \ S4 \ NO2)
          +1.015e^{-05} \times I(PT08 \ S3 \ NOx*RH)
          +2.375e^{-04} \times I(PT08 \ S4 \ NO2*AH)
          -2.976e^{-05} \times I(PT08 \ S5 \ O3*T)
```

6 Thực Nghiệm và Phân Tích Kết Quả

Qua quá trình phân tích ANOVA trên 2 bộ dữ liệu REMOVE và MEAN, với bộ dữ liệu REMOVE ta có 3 loại: REMOVE gốc, REMOVE đơn thuộc tính và REMOVE tương tác 2 thuộc tính; với bộ dữ liệu MEAN ta có 2 loại: MEAN gốc và MEAN tương tác 2 thuộc tính. Ta tiến hành cài đặt các mô hình, thuật toán đã trình bày trong Phần 4 trên các bộ dữ liệu và đánh giá kết quả thông qua các độ đo $R^2, MSE, RMSE, MAE$ để so sánh kết quả đạt được.

Với từng bộ dữ liệu, chúng tôi chia 80% cho tập training và 20% cho tập testing. Kích thước của các tập dữ liệu được trình bày tại Bảng 2:

		Train shape	Test shape
	Gốc	(6139, 11)	(1535, 11)
REMOVE	ANOVA đơn	(6139, 9)	(1535, 9)
	thuộc tính	(0100, 0)	(1000, 0)
	ANOVA tương	(6139, 16)	(1535, 16)
	tác 2 thuộc tính	(0100, 10)	(1999, 10)
MEAN	Gốc	(7485, 11)	(1872, 11)
WIEAN	ANOVA tương	(7485, 26)	(1872, 26)
	tác 2 thuộc tính	(1400, 20)	(1012, 20)

Bảng 2: Kích thước của các tập dữ liệu.

Để tránh tính ngẫu nhiên, chúng tôi thực hiện 5 lần chạy và ghi lại kết quả, sau đó tính kết quả trung bình của 5 lần chạy. Kết quả trung bình được thể hiện tại Bảng 3.

				Tra	ain			Te	est	
			R^2	MSE	RMSE	MAE	R^2	MSE	RMSE	MAE
		LR	0.8863	0.2407	0.4907	0.3098	0.8880	0.2333	0.4830	0.3096
		DT	0.9355	0.1365	0.3695	0.2502	0.8956	0.2176	0.4664	0.3070
	Gốc	RF	0.9875	0.0265	0.1629	0.0999	0.9243	0.1577	0.3971	0.2490
		SVR	0.9451	0.1162	0.3409	0.1959	0.9310	0.1438	0.3792	0.2285
		NN	0.9421	0.1226	0.3500	0.2304	0.9255	0.1552	0.3940	0.2571
	ANOVA	LR	0.8863	0.2409	0.4908	0.3095	0.8880	0.2333	0.4830	0.3091
	đơn	DT	0.9354	0.1368	0.3698	0.2497	0.8977	0.2131	0.4616	0.3020
REMOVE	thuộc	RF	0.9873	0.0269	0.1640	0.1004	0.9241	0.1580	0.3975	0.2497
	tính	SVR	0.9447	0.1171	0.3422	0.1968	0.9311	0.1435	0.3789	0.2275
	611111	NN	0.9398	0.1274	0.3569	0.2363	0.9233	0.1598	0.3997	0.2625
	ANOVA	LR	0.8994	0.2131	0.4616	0.2972	0.9036	0.2009	0.4482	0.2929
	tương	DT	0.9368	0.1338	0.3658	0.2484	0.8945	0.2198	0.4688	0.3046
	tác 2	RF	0.9869	0.0278	0.1668	0.1025	0.9190	0.1687	0.4108	0.2578
	thuộc	SVR	0.9453	0.1158	0.3403	0.2003	0.9271	0.1519	0.3897	0.2379
	tính	NN	0.9462	0.1141	0.3376	0.2260	0.9241	0.1581	0.3976	0.2655
		LR	0.7921	0.3535	0.5946	0.4025	0.8136	0.3461	0.5883	0.3964
		DT	0.8851	0.1955	0.4421	0.3093	0.8174	0.3390	0.5823	0.3828
	Gốc	RF	0.9776	0.0381	0.1952	0.1261	0.8738	0.2343	0.4841	0.3144
		SVR	0.8820	0.2007	0.4480	0.2624	0.8641	0.2523	0.5023	0.2997
MEAN		NN	0.8871	0.1920	0.4381	0.2999	0.8706	0.2402	0.4901	0.3305
MEAN	ANOVA	LR	0.8139	0.3165	0.5626	0.3860	0.8364	0.3037	0.5511	0.3775
	tương	DT	0.8844	0.1966	0.4434	0.3041	0.8054	0.3612	0.6010	0.3800
	tác 2	RF	0.9768	0.0394	0.1986	0.1297	0.8688	0.2437	0.4936	0.3197
	thuộc	SVR	0.8810	0.2024	0.4498	0.2661	0.8604	0.2593	0.5092	0.3060
	tính	NN	0.8943	0.1798	0.4239	0.2899	0.8658	0.2491	0.4990	0.3372

Bảng 3: Kết quả trung bình trên 5 lần chạy.

Từ kết quả tại Bảng 3 ta có thể thấy rằng:

- Về độ đo: Để dễ so sánh hiệu suất của các mô hình với các bộ dữ liệu khác nhau, chúng tôi thống nhất chọn độ đo RMSE để so sánh hiệu suất giữa các mô hình và bộ dữ liệu khác nhau. Kết quả được đánh giá trên tập test.
- Về thuật toán: Linear Regression (LR) cho kết quả tệ nhất trong 5 mô hình; Decision Tree Regression (DT) cho kết quả tốt hơn mô hình LR nhưng lại bị vấn đề overfitting⁸ nhẹ (chênh lệch độ đo RMSE giữa train và test trên các bộ dữ liệu khác nhau là ~ 0.1); Random Forest Regression (RF) mô hình này rất tệ vì bị hiện tượng overfitting khá nghiêm trọng (chênh lệch độ đo RMSE giữa train và test trên các bộ dữ liệu khác nhau là ~ 0.25). Support Vector Regression (SVR) cho kết quả tốt và ổn định nhất. Neural Network (NN) cho kết quả khá tốt chỉ xếp sau mô hình SVM, đặt biệt ở bộ dữ liệu MEAN kết quả của NN còn tốt hơn SVR.
- **Về bộ dữ liệu:** Bộ dữ liệu REMOVE cho kết quả trung bình cao hơn bộ dữ liệu MEAN (chênh lệch RMSE train ~ 0.03 và RMSE test ~ 0.1).

Bộ dữ liệu và thuật toán:

- \bullet REMOVE: LR cho kết quả tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2thuộc tính (RMSE giảm từ 0.4830 còn 0.4482). DT cho kết quả tốt hơn khi thực hiện ANOVA đơn thuộc tính nhưng kết quả khi ANOVA tương tác 2 thuộc tính lại không tốt bằng dữ liệu gốc (RMSE lần lượt là 0.4664, 0.4616 và 0.4688). RF đạt kết quả tốt nhất trên bộ dữ liệu gốc và hiệu suất giảm dần khi thực hiện ANOVA đơn thuộc tính và ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.3971, 0.3975 và 0.4108). SVR tương tư như DT, cho kết quả tốt hơn khi thực hiện ANOVA đơn thuộc tính nhưng kết quả khi ANOVA tương tác 2 thuộc tính lại không tốt bằng dữ liệu gốc (RMSE lần lượt là 0.3792, 0.3789 và 0.3897). NN cho kết quả trên giữ liệu gốc là tốt nhất và hiệu suất giảm dần trên dữ liệu ANOVA tương tác 2 thuộc tính và ANOVA đơn thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.3940, 0.3976 và 0.3997). Nhìn chung SVR là mô hình cho kết quả tốt, ổn định nhất trên tất cả các bộ dữ liêu và mô hình đạt kết quả tốt nhất trên bộ dữ liệu ANOVA đơn thuộc tính, nên mô hình được chon là mô hình sử dụng thuật toán SVR trên bộ dữ liệu REMOVE ANOVA đơn thuộc tính.
- MEAN: LR cho kết quả tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE giảm từ 0.5883 còn 0.5511). DT cho kết quả trên bộ dữ liệu gốc tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.5823 và 0.6010). RF cho kết quả trên bộ dữ liệu gốc tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.4841 và 0.4936). SVR cho kết quả trên bộ dữ liệu gốc tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.5023 và 0.5092). NN cho kết quả trên bộ dữ liệu gốc tốt hơn khi thực hiện ANOVA tương tác 2 thuộc tính (RMSE lần lượt là 0.4901 và 0.4990). Nhìn chung mô hình sử dụng thuật toán RF và bộ dữ liệu gốc là cho kết quả tốt nhất,

 $^{^8}$ Overfitting là hiện tượng mô hình quá khớp với dữ liệu training, nhưng kết quả trên tập testing lại thấp.

nhưng vì mô hình bị hiện tượng overfitting khá nghiệm trong nên ta sẽ không chọn mô hình này, ta chọn mô hình ổn định hơn là NN trên bộ dữ liệu MEAN gốc.

Qua các kết quả phân tích ở trên, ta thấy:

- Dữ liệu xử lý missing values theo chiến lược REMOVE cho kết quả cao hơn dữ liệu xử lý missing values bằng chiến lược MEAN ở tất cả các mô hình. Điều này chứng tỏ việc xử lý dữ liệu missing values theo chiến lược REMOVE là tốt hơn chiến lược MEAN. Thật vậy, trong thực tế việc xử lý missing values theo chiến lược MEAN là không tốt, dễ tạo ra các nhiễu loạn làm ảnh hưởng lớn đến hiệu suất dự đoán của mô hình. Ngoài cách xử lý dữ liệu missing values theo chiến lược REMOVE thì chúng tôi cũng đề xuất một cách xử lý dữ liệu missing values khác là lấy mean theo ngày/giờ của từng thuộc tính.
- Bộ dữ liệu ban đầu đã có được hiệu suất rất tốt, nên quá trình thực hiện phân tích ANOVA để loại bỏ các thuộc tính ít ảnh hưởng đến đầu ra hoặc xem xét các tương tác của các thuộc tính nhằm tạo ra các bộ dữ liệu mới không thực sự quá hiệu quả để cải thiện hiệu suất dự đoán của các mô hình. Tuy nhiên, chúng ta có thể dùng ANOVA đơn thuộc tính để loại bỏ bớt các thuộc tính ít ảnh hưởng đến mô hình nhưng vẫn đảm bảo mô hình giữ nguyên hiệu suất dự đoán hoặc cao hơn đôi chút, từ đó có thể giảm kích thước của bộ dữ liệu, giảm được chi phí tài nguyên và tính toán.
- Mô hình cuối cùng tốt nhất mà chúng tôi đạt được là mô hình sử dụng thuật toán Support Vector Regression kết hợp với bộ dữ liệu REMOVE ANOVA đơn thuộc tính (RMSE = 0.3789).

7 Kết Luận

Trong báo cáo này, chúng tôi đã thực hiện tìm hiểu, phân tích và xây dựng mô hình dư đoán nồng đô CO trong không khí dựa trên bộ dữ liệu Air Quality. Với bộ dữ liệu Air Quality ban đầu có nhiều missing values, nên chúng tôi đã tiến hành các phương pháp xử lý missing values và cho ra 2 bộ dữ liệu mới là: Air Quality-REMOVE và Air Quality-MEAN. Thực hiện quá trình phân tích ANOVA trên 2 bộ dữ liệu REMOVE và MEAN, chúng tôi thu được các bộ dữ liệu sau: REMOVE gốc, REMOVE ANOVA đơn thuộc tính, REMOVE ANOVA tương tác 2 thuộc tính, MEAN gốc và MEAN ANOVA tương tác 2 thuộc tính. Tiếp theo, chúng tôi tiến hành thực nghiệm các bộ dữ liệu với các mô hình sử dụng các thuật toán: Linear Regression, Decision Tree Regression, Random Forest Regression, Support Vector Regression và Neural Network. Kết quả tốt nhất mà chúng tối đạt được là mô hình Support Vector Regression được huấn luyện trên bộ dữ liệu REMOVE ANOVA đơn thuộc tính, với độ đo RMSE = 0.3789. Bô dữ liêu gốc đã có được hiệu suất tốt nên quá trình phân tích ANOVA không thực sư giúp cải thiên đáng kế kết quả dư đoán của mô hình. Tuy nhiên, chúng ta có thể dùng ANOVA đơn thuộc tính để loại bỏ bớt các thuộc tính ít ảnh hưởng đến mô hình nhưng vẫn đảm bảo mô hình giữ nguyên hiệu suất dư đoán hoặc cao hơn đôi chút, từ đó có thể giảm kích thước của bộ dữ liệu, giảm được chi phí tài nguyên và tính toán.

Hướng phát triển trong tương lai:

- Bộ dữ liệu: Xử lý các missing values tốt hơn nữa, như đề suất ở phần trước là thử xử lý các missing values bằng cách điền bằng các giá trị mean của từng thuộc tính theo ngày/giờ. Ngoài ra, chúng ta có thể tiến hành thu thập thêm dữ liệu từ thực tế thông qua các cảm biến (sensor).
- Mô hình: Áp dụng các kỹ thuật, mô hình Deep Learning như: RNN, LSTM, ... và các mô hình Time Series như: ARIMA, ... để cải thiện kết quả dự đoán tốt hơn nữa.

Tài liệu

- 1. Saverio, D. V., Massera, E., Piga, M., Martinotto, L., Francia, G. D.: On field calibration of an electronic nose for benzene estimation in an urban pollution monitoring scenario, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 129(2), 750–757.
- 2. Saverio, D. V.: ENEA National Agency for New Technologies, Energy and Sustainable Economic Development. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://archive.ics.uci.edu/ml/datasets/Air+Quality, Air Quality Data Set.
- 3. Tran Quang Quy: Department of Computer Sciences & Technology. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://rpubs.com/tranquangquy_ictu/769561, Correlation Coefficient.
- 4. Toploigiai. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://toploigiai.vn/cach-nhan-xet-bieu-do-hop, Box Plot.
- Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://vi.wikipedia.org/wiki/C%C3%A2y_quy%E1%BA%BFt_%C4%91%E1%BB%8Bnh, Cây quyết định.
- Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://vi.wikipedia.org/wiki/M%C3%A1y_vect%C6%A1_h%E1%BB%97_tr%E1%BB%A3, Máy vecto hỗ trợ.
- 7. Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://vi.wikipedia.org/wiki/M%E1%BA%A1ng_th%E1%BA%A7n_kinh_nh%C3%A2n_t%E1%BA%A1o, Mang thần kinh nhân tạo.
- 8. Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://en.wikipedia.org/wiki/Coefficient_of_determination, Coefficient of determination.
- 9. Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://vi.wikipedia.org/wiki/Sai_s%E1%BB%91_to%C3%AOn_ph%C6%B0%C6%A1ng_trung_b%C3%ACnh, Sai số toàn phương trung bình.
- 10. Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://en.wikipedia.org/wiki/Root-mean-square_deviation, Root-mean-square deviation.
- 11. Wikipedia. Accessed: 6 July 2022 [Online]. Available https://en.wikipedia.org/wiki/Mean_absolute_error, Mean absolute error.