Phương pháp toán nâng cao cho TTNT

Thông tin học viên

- Họ và tên: Lê Nhựt Nam
- MSHV: 22C11067

Bài tập về nhà

BT1:

Khảo sát 2 đại lượng x, y. Cho bảng dữ liệu sau:

x	**0.1**	**0.2**	**0.3**	**0.4**
y	10.1	10.4	10.7	11.2

Với mô hình được cho sau, xác định các tham số a, b, c của mô hình

$$y = f(x) = ax^2 + bx + c$$

Lời giải: Dùng phương pháp bình phương tối tiểu (ordinary least squares) để giải quyết bài toán

Rất dễ dàng có được dạng cho bài toán:

$$y = \boldsymbol{x}^\top \boldsymbol{\theta} + \epsilon, \quad \epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Trong đó $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^D$ là các giá trị đầu vào (biến độc lập) và $y \in \mathbb{R}$ là giá trị quan sát (biến phụ thuộc). Parameter vector $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^D$ tham số hóa hàm số.

Sử dụng ước lượng triển vọng cực đại (Maximum Likelihood Estimate), ta có thể hoàn toàn tìm được tham số $\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{ML}}$ mà cực đại triển vọng:

$$P(\mathcal{Y}|\mathcal{X}, \boldsymbol{\theta}) = \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} P(y_1, \boldsymbol{\theta}_1, \ldots, y_N, \boldsymbol{\theta}_N | \boldsymbol{\theta}) = \prod_{n=1}^{N} P(y_n | \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{\theta})\,.$$

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\theta} &= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} P(y_1, \mathbf{x}_1, \ldots, y_n, \mathbf{x}_n | \boldsymbol{\theta}) \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i=1}^{n} P(y_i, \mathbf{x}_i | \boldsymbol{\theta}) && \text{Vì các điểm dữ liệu được lấy mẫu một cách độc lập.} \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i=1}^{n} P(y_i | \mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) P(\mathbf{x}_i | \boldsymbol{\theta}) && \text{Luật xích xác suất.} \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i=1}^{n} P(y_i | \mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) P(\mathbf{x}_i) && \mathbf{x}_i \text{ thì độc lập với } \boldsymbol{\theta}, \text{ chỉ mô hình hóa } P(y_i | \mathbf{x}) \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \prod_{i=1}^{n} P(y_i | \mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) && P(\mathbf{x}_i) \text{ là hằng số, có thể bỏ đi.} \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{n} \log[P(y_i | \mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})] && \text{hàm `log` là hàm đơn điệu.} \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \sum_{i=1}^{n} \left[\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \right) + \log\left(e^{-\frac{(\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\theta} - y_i)^2}{2\sigma^2}} \right) \right] && \text{Đưa phân phối xác suất vào.} \\
&= \operatorname*{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\theta} - y_i)^2 && \text{Hệ số đầu tiên là một hằng số, và } \log(e^z) = z \\
&= \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{\theta}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\mathbf{x}_i^\top \boldsymbol{\theta} - y_i)^2 && \text{Luôn luôn có cực tiểu; } \frac{1}{n} \text{ thể hiện trung bình độ lỗi.}
\end{aligned}$$

Đưa về bài toán bình phương tối tiểu và chứng minh được nghiệm bài toán là duy nhất và có công thức là:

$$\boldsymbol{\theta}^{\mathrm{ML}} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^D\,,$$

Trong đó:

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_N]^\top \in \mathbb{R}^{N \times D}, \quad \boldsymbol{y} = [y_1, \ldots, y_N]^\top \in \mathbb{R}^N\,.$$

Nhưng mô hình cần ước lượng không phải dạng đường thẳng, đó là một đường cong. Có nghĩa là, chúng ta cần học một hàm

$$f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_{k=1}^{K} \theta_k \phi_k(\boldsymbol{x})\,,$$

Trong đó: đặc trưng $\phi_k(\boldsymbol{x})$ (có khả năng phi tuyến) biến đổi của các giá trị đầu vào $\boldsymbol{x}$.

Nhìn vào dạng mô hình trên, đó là một đa thức bậc hai (một cách tổng quát cho trường hợp đa thức bậc K)

$$\sum_{k=0}^{K} \theta_k x^k = \boldsymbol{\phi}(x)^\top \boldsymbol{\theta}\,, \quad \boldsymbol{\phi}(x) = \begin{bmatrix} x^0 \\ x^1 \\ \vdots \\ x^K \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{K+1}\,.$$

$\boldsymbol{\phi}(x)$ là một đặc trưng biến đổi phi tuyến của các giá trị đầu vào $x \in \mathbb{R}$.

Một cách tương tự, định nghĩa lại ma trận cho tất cả các biến đổi đặc trưng phi tuyến cho dữ liệu đầu vào:

$$\boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}(x_1) & \boldsymbol{\phi}(x_2) & \cdots & \boldsymbol{\phi}(x_n) \end{bmatrix}^\top \in \mathbb{R}^{N \times K+1}$$

Chứng minh được nghiệm bài toán là duy nhất và có công thức là:

$$\boldsymbol{\theta}^{\text{ML}} = (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y}$$

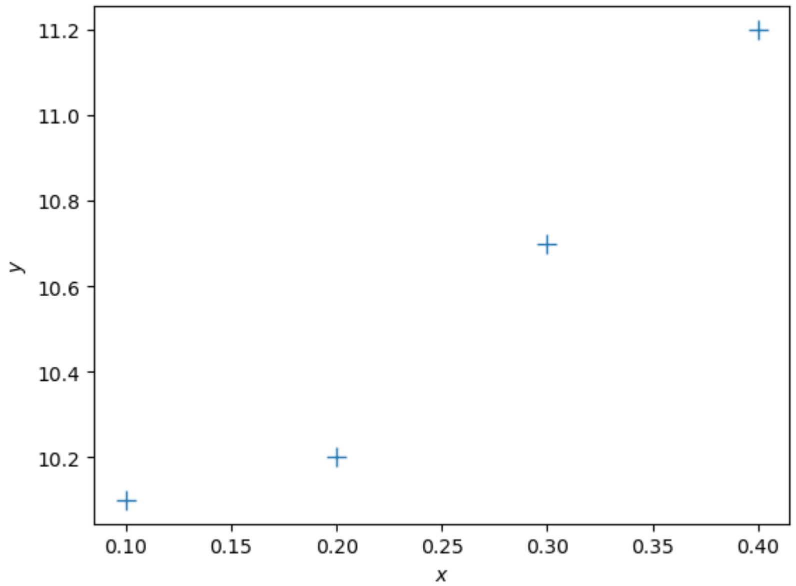
Nghiệm tối ưu hóa tính toán số học:

$$\boldsymbol{\theta}^{\text{ML}} = (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi} + \kappa \boldsymbol{I})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{y}, \kappa > 0$$

In [ ]:
```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

In [ ]:
```
# Định nghĩa tập huấn luyện
X = np.array([0.1, 0.2, 0.3, 0.4]).reshape(-1,1) # 4x1 vector, N=4, D=1
y = np.array([10.1, 10.2, 10.7, 11.2]).reshape(-1,1) # 4x1 vector

# Trực quan hóa
plt.figure()
plt.plot(X, y, '+', markersize=10)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$");
```



In [ ]:
```
# Tính toán đặc trưng phi tuyến
# X: đầu vào có size N x 1
# K: bậc của đa thức
# tính toán ma trận đặc trưng Phi (N x (K+1))

N = X.shape[0]
K = 2

X = X.flatten()

Phi = np.zeros((N, K+1))
for k in range(K+1):
    Phi[:,k] = X**k

Phi
```

Out[ ]:
```
array([[1.  , 0.1 , 0.01],
       [1.  , 0.2 , 0.04],
       [1.  , 0.3 , 0.09],
       [1.  , 0.4 , 0.16]])
```

In [ ]:
```
kappa = 1e-08
theta_ml = np.linalg.inv(Phi.T @ Phi + kappa*np.eye(Phi.shape[1])) @ Phi.T @ y
theta_ml
```

Out[ ]:
```
array([[10.09998591],
       [-1.19986045],
       [ 9.99972238]])
```

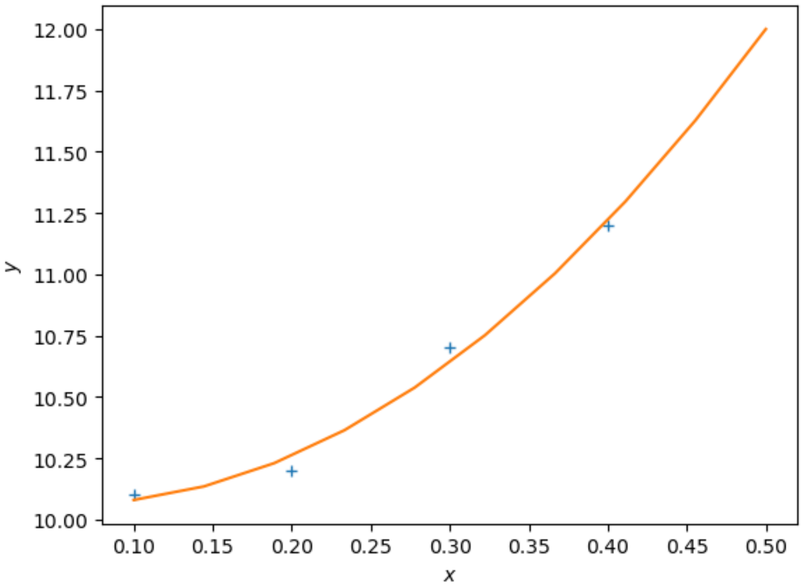
In [ ]:
```
Xtest = np.linspace(0.1,0.5,10).reshape(-1,1)

Xtest = Xtest.flatten()

Phi_test = np.zeros((Xtest.shape[0], K+1))
for k in range(K+1):
    Phi_test[:,k] = Xtest**k

y_pred = Phi_test @ theta_ml

plt.figure()
plt.plot(X, y, '+')
plt.plot(Xtest, y_pred)
plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$y$");
```



BT2

Tương tự BT1

Khảo sát 2 đại lượng x, y. Cho bảng dữ liệu sau:

x_1	x_2	y
1	2	3
2	1	5
3	4	13
4	1	17

Với 2 mô hình tự đề xuất, xác định các tham số của mô hình.

Lời giải: Nhận thấy dữ liệu có thể mô hình hóa đơn giản bằng mô hình hồi quy tuyến tính bội

$$y_i = \theta_0 + \sum_{j=1}^{p} \theta_j x_{ij} + e_i, \forall i \in \{1, \ldots, n\}$$

Trong đó:

- $y_i \in \mathbb{R}$ là giá trị thực tương ứng với quan sát thứ i
- $\theta_0 \in R$ là hệ số chặn hồi quy (regression intercept)
- $\theta_j \in \mathbb{R}$ là các hệ số hồi quy (regression slope) của giá trị dự đoán thứ j
- $x_{ij} \in \mathbb{R}$ là giá trị dự đoán thứ j cho quan sát thứ i
- $e_i \overset{\text{iid}}{\sim} \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ một Gaussian Error

Hay viết gọn hơn bằng dạng ma trận như sau

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\theta + \mathbf{e}$$

Trong đó:

- $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \ldots, y_n)' \in \mathbb{R}^n$ có kích thước $n \times 1$ là vector các giá trị tương ứng với biến quan sát
- $\mathbf{X} = [\mathbf{1_n}, \mathbf{x_1}, \mathbf{x_2}, \ldots, \mathbf{x_p}] \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$ có kích thước $n \times (p+1)$ là ma trận biến quan sát
- $\theta = (\theta_0, \theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_p)' \in \mathbb{R}^{p+1}$ có kích thước $(p+1) \times n$ là vector các hệ số hồi quy (coefficient vector)
- $\mathbf{e} = (e_1, e_2, \ldots, e_n)' \in \mathbb{R}^n$ là vector độ lỗi (error vector)

Chứng minh được bài toán có nghiệm duy nhất bằng phương pháp ước lượng triển vọng cực đại

$$\boldsymbol{\theta}^{\text{ML}} = (\boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{\theta})^{-1} \boldsymbol{\theta}^\top \boldsymbol{y}$$

In [ ]:
```
# Định nghĩa tập huấn luyện
X = np.array([[1, 2], [2, 1], [3, 4], [4, 1]])
y = np.array([3, 5, 13, 17])
```

In [ ]:
```
X_aug = np.hstack([np.ones((X.shape[0],1)), X])
X_aug
```

Out[ ]:
```
array([[1., 1., 2.],
       [1., 2., 1.],
       [1., 3., 4.],
       [1., 4., 1.]])
```

In [ ]:
```
theta_ml = np.linalg.pinv(X_aug) @ y
print("Dạng hàm thứ nhất: f(x_1, x_2) = {}x_1 + {}x_2 + {}".format(theta_ml[1], theta_ml[2], theta_ml[0]))
```

```
Dạng hàm thứ nhất: f(x) = 4.999999999999999x_1 + 0.6666666666666687x_2 + -4.333333333333333
```

In [ ]:
```
# Phần dư r
X_aug @ theta_ml - y
```

Out[ ]:
```
array([-1.        ,  1.33333333,  0.33333333, -0.66666667])
```

In [ ]:
```
def polynomial_features(x, order):
    x = np.asarray(x).T[np.newaxis]
    n = x.shape[1]
    power_matrix = np.tile(np.arange(order + 1), (n, 1)).T[..., np.newaxis]
    X = np.power(x, power_matrix)
    I = np.indices((order + 1, ) * n).reshape((n, (order + 1) ** n)).T
    F = np.product(np.diagonal(X[I], 0, 1, 2), axis=2)
    return F.T

Phi_X = polynomial_features(X, 2)
Phi_X
```

Out[ ]:
```
array([[  1,   2,   4,   1,   2,   4,   1,   2,   4],
       [  1,   1,   1,   2,   2,   2,   4,   4,   4],
       [  1,   4,  16,   3,  12,  48,   9,  36, 144],
       [  1,   1,   1,   4,   4,   4,  16,  16,  16]])
```

In [ ]:
```
theta_ml = np.linalg.pinv(Phi_X) @ y
theta_ml
print("Dạng hàm thứ hai: f(x_1, x_2) = {} + {}x1 + {}x1**2 + {}x2 + {}x1*x2 + {}x1**2*x2 + {}x2**2 + {}x1*x2**2
```

```
Dạng hàm thứ hai: f(x_1, x_2) = 0.13688512309179662 + 0.19963250473706284x1 + 0.17306491081965936x1**2 + 0.1833
9569086805763x2 + 0.07779978631944456x1*x2 + 0.5900341336632491x1**2*x2 + 0.4741074490662376x2**2 + -0.13651831
406401346x1*x2**2 + 0.08446852149492834x1**2*x2**2
```

In [ ]:
```
# Phần dư r
Phi_X @ theta_ml - y
```

Out[ ]:
```
array([-3.55271368e-15,  3.55271368e-15, -1.77635684e-14,  3.55271368e-15])
```