

รายงานโครงการวิศวกรรมไฟฟ้า วิชา 2102499 ปีการศึกษา 2559

การวิเคราะห์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์สำหรับข้อมูลสมองจากการตอบสนองต่อสิ่งเร้า

Granger causality analysis of task-related fMRI time series

นายปฐวี ปราการกมานันท์ ID 5630349021
อาจารย์ที่ปรึกษา ผศ.ดร. จิตโกมุท ส่งศิริ
ภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า คณะวิศวกรรมศาสตร์
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

แบบจำลองเชิงเส้นหนึ่งที่นิยมใช้ในการอธิบายความสัมพันธ์ของส่วนต่างๆในสมองจากข้อมูลสมอง fMRI คือแบบจำลองถดถอยตัวเอง (แบบจำลอง AR) แต่แบบจำลองดังกล่าวนั้นไม่มีพจน์ที่อธิบายพลวัตของสมองอันเนื่องมาจากสัญญาณภายนอก ในขณะที่ข้อมูล fMRI ส่วนใหญ่นั้นอาจได้มาจากการทดลองที่มีการกระตุ้นด้วยสิ่งเร้าภายนอก โครงการนี้จึงพิจารณาการใช้แบบจำลองถดถอยตัวเองที่มีสัญญาณขาเข้าภายนอก (ARX) เพราะมีสมมุติฐานว่าเมื่อเพิ่มพจน์ของสัญญาณขาเข้า การประมาณแบบจำลองจะสามารถทำได้ดีขึ้น โครงการนี้ได้นำเสนอรูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่สามารถบ่งชี้ความสัมพันธ์ของส่วนต่างๆในสมองโดยยึดหลักความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ การหารูปแบบเกรนเจอร์ในแบบจำลอง ARX ทำได้โดยการเพิ่มฟังก์ชันลงโทษแบบ ℓ_1 เข้าไปในปัญหาการประมาณด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดจึงทำให้ปัญหาดังกล่าวอยู่ในรูปคอนเวกซ์ที่หาอนุพันธ์ไม่ได้ โครงการนี้จึงประยุกต์ใช้ขั้นตอนเชิงเลขวิธี Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM) ในการแก้ปัญหาเพื่อลดขั้นตอนในการคำนวณและพื้นที่ในการเก็บข้อมูล ผลการทดลองเปรียบเทียบแบบจำลองทั้ง 2 แบบ พบว่าการเลือกใช้แบบจำลองเหมาะสมกว่าในแง่ของการหารูปแบบเกรนเจอร์และความผิดพลาดของพารามิเตอร์ในแบบจำลอง หากข้อมูล fMRI ที่ใช้นั้นมาจากการทดลองที่มีการกระตุ้นจากสิ่งเร้าภายนอกควรเลือกใช้แบบจำลอง ARX มากกว่าแบบจำลอง AR

คำสำคัญ: fMRI, ความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์, แบบจำลอง ARX, ADMM, การหาค่าเหมาะสมสุดแบบคอนเวกซ์

Abstract

A linear model which is popular to explain about relationships between any parts in a brain is the autoregressive model. The AR model does not have any terms to explain dynamics of brain form external signal but most of fMRI experiments have external stimulation. This project considers in the autoregressive with exogenous input (ARX model) because we have a hypothesis that if we add input terms, a model estimation will be improved. We present problem formulation that shows the relationships between any parts of the brain and holds Granger causality. This problem is non-smooth convex optimization problem. We use Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM) to reduce a cost computation and memory storage. We compared the result of estimation model with AR and ARX model. We found that estimation of ARX model is better than AR model when we compared about the parameter estimation and Granger causality pattern. We have the conclusion that we should use ARX model rather than AR model to explain a task-fMRI time series.

Keywords: fMRI, Granger causality, ARX model, ADMM, Convex optimization

สารบัญ

1	บทนำ	4
2	ภาพรวมของโครงการ	4
3	ข้อมูลสมองแบบ fMRI	5
3.1	หลักการทำงานของเครื่อง MRI scanner	5
3.2	Blood-Oxygen-Level-Dependent (BOLD) signal	6
3.3	ประเภทการทดลองของ fMRI	7
3.3.1	Resting state	7
3.3.2	Task fMRI	7
3.4	ตัวอย่างข้อมูล task-fMRI	8
4	สภาพเชื่อมโยงของสมองและโครงสร้างเชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์	9
5	รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX	10
5.1	รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองที่ไม่มีเงื่อนไขเกรนเจอร์	10
5.2	รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองที่มีเงื่อนไขเกรนเจอร์	11
5.3	รูปแบบการประมาณแบบจำลองที่บังคับความสัมพันธ์แบบเกรนเจอร์	12
6	ขั้นตอนเชิงเลขที่ใช้แก้ปัญหาการประมาณ	13
7	ผลลัพธ์ของโครงการ	15
8	ผลการทดลอง	15
8.1	การเปรียบเทียบผลการประมาณกับข้อมูลที่เกิดจากระบบที่มีสัญญาณกระตุ้นด้วยแบบจำลอง AR และ ARX	16
8.1.1	ผลการประมาณของรูปแบบเกรนเจอร์	16
8.1.2	ผลการประมาณความผิดพลาดแบบจำลองในส่วนของการถดถอยตัวเอง	18
8.2	การเปรียบเทียบผลการประมาณแบบจำลอง ARX กับข้อมูลที่เกิดจากระดับการกระตุ้นที่ต่างกัน	18
8.2.1	ความผิดพลาดการประมาณพารามิเตอร์ในแบบจำลอง	19
8.2.2	ความถูกต้องของรูปแบบเกรนเจอร์บนแบบจำลอง	20
8.2.3	ความถูกต้องของการเลือกอันดับแบบจำลอง	21
9	สรุปภาพรวมของโครงการ	22
10	กิตติกรรมประกาศ	22
11	ภาคผนวก	24
11.1	ความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ที่ใช้ในสภาพเชื่อมโยงของสมอง	24
11.1.1	Pairwise Granger Causality (GC)	24
11.1.2	Conditional Granger Causality	24
11.2	การแปลงปัญหาการหาค่าเหมาะสมที่สุดในรูปแบบเมทริกซ์เป็นรูปแบบเวกเตอร์	25
11.3	ขั้นตอนวิธี ADMM	27
11.3.1	การใช้ ADMM รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่บังคับถึงเงื่อนไขเกรนเจอร์	27
11.3.2	ขั้นตอนวิธีการคำนวณคำตอบของปัญหาการประมาณแบบจำลอง	28
11.4	ปัญหาการประมาณแบบจำลองในรูปแบบ Lasso และ Group Lasso	29
11.5	วิธีการคำนวณค่า BIC ของแบบจำลอง ARX	32
11.6	ชุดคำสั่ง MATLAB ที่ใช้ในโครงการ	33

สารบัญรูป

1	เครื่อง MRI scanner (ตรวจสุขภาพลึกเข้าไป'MRI'เห็นข้างในรู้ทันโรค) [1]	5
2	การแปลงฟูเรียร์เพื่อที่จะได้ภาพจากเครื่อง MRI (The Statistical analysis of fMRI data) [2]	6
3	ตัวอย่างสัญญาณ BOLD ตัวอย่างสัญญาณจะอยู่ในลักษณะคล้ายผลตอบสนองอิมพัลส์ที่มีความสัมพันธ์ระหว่างการกระตุ้นกับ HRF แต่ว่าจะมีช่วงแรกของกระตุ้นที่จะมีค่าที่ตกลงไปเล็กน้อย [2]	6
4	ความสัมพันธ์สัญญาณ BOLD กับการทำงานในระบบประสาท (How well do we understand the neural origins of the fMRI BOLD signal?) [3]	7
5	การออกแบบการทดลองของ block design และ event-related design block design เป็นการออกแบบสัญญาณขาเข้าที่มีความต่อเนื่องของ delta function และ event-related design ที่การกระจายของ delta function แบบสุ่ม (The Statistical analysis of fMRI data) [2]	8
6	A:การทดลองแบบ VM, B:การทดลองแบบ MV (fMRI hemodynamics accurately reflects neuronal timing in the human brain measured by MEG) [4]	9
7	ผลการประมาณรูปแบบเกรนเจอร์สำหรับแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX โดยใช้รูปแบบปัญหา (12) ที่ค่า λ ต่างกัน	17
8	ความผิดพลาดของแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX เทียบกับค่า λ เมื่อเฉลี่ยบนข้อมูล 30 ชุด	18
9	ตัวอย่างของสัญญาณขาเข้าที่ใช้ในการทดลองเปรียบเทียบผลของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่แตกต่างกัน	19
10	กราฟแสดงถึงความผิดพลาดในการประมาณแบบจำลอง ARX เมื่อข้อมูลที่ใช้ในการประมาณมีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่างกัน หมายเลข 1 เป็นค่าความผิดพลาดของ \hat{A}_1 หมายเลข 2 คือค่าผิดพลาดของ \hat{A}_2 หมายเลข 3 คือค่าผิดพลาดของ \hat{B} และหมายเลข 4 คือค่าผิดพลาดเฉลี่ยของพารามิเตอร์ทั้ง 3 ตัว dense แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูงและ sparse แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ	20
11	ผลการประมาณรูปแบบเกรนเจอร์ของแบบจำลอง ARX จากข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่างกัน โดยใช้รูปแบบปัญหา (12) ที่ค่า λ หลายค่า dense แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูง sparse แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ	20
12	BIC ของแบบจำลองอันดับต่างกัน	22
13	ตัวอย่างความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ของ x, y และ z	25

1 บทนำ

เทคโนโลยี functional magnetic resonance imaging (fMRI) เป็นเทคโนโลยีที่ใช้ศึกษากระบวนการทำงานของสมองมนุษย์ที่แสดงออกมาเป็นภาพ 3 มิติ หลักการของ fMRI คือการวัดความเข้มข้นของออกซิเจนในเลือด [2] ค่าความเข้มข้นของออกซิเจนที่วัดออกมาเรียกว่าสัญญาณโบลด์ (blood-oxygen-level-dependent หรือ BOLD) (รายละเอียดของสัญญาณโบลด์จะกล่าวละเอียดในหัวข้อ 3.2) ภาพที่ได้จาก fMRI อธิบายด้วยจุดของภาพ fMRI ที่เรียกว่าวอกเซล (voxel) สัญญาณโบลด์ในแต่ละวอกเซลแสดงออกมาเป็นตัวเลขสามารถใช้อธิบายระดับออกซิเจนในเลือดของแต่ละตำแหน่งในสมองได้

แบบจำลองถดถอยตัวเอง (Autoregressive model หรือแบบจำลอง AR) เป็นหนึ่งในแบบจำลองที่ใช้ในการอธิบายข้อมูล fMRI [5] โดยใช้ข้อมูลสัญญาณขาออกในอดีตเพื่อที่จะทำนายค่าสัญญาณขาออกในปัจจุบันแสดงดังสมการ (1)

$$y(t) = A_1y(t-1) + A_2y(t-2) + \dots + A_p y(t-p) + e(t) \quad (1)$$

เมื่อ y คือสัญญาณขาออก, e คือสัญญาณรบกวน, A_k เป็นเมทริกซ์ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัญญาณขาออกในปัจจุบันกับสัญญาณขาออกในอดีต ข้อดีของการเลือกใช้แบบจำลอง AR คือ แบบจำลองเป็นแบบจำลองเชิงเส้นง่ายต่อการทำความเข้าใจ ข้อเสียของการเลือกใช้แบบจำลอง AR คือ แบบจำลองไม่สามารถอธิบายการกระตุ้นจากสิ่งเร้าภายนอกได้ แต่การทดลอง fMRI โดยทั่วไปมีการกระตุ้นจากภายนอก เช่น การทดลองของ Friston และคณะ [6] มีการกระตุ้นด้วยการเห็นภาพและการขยับ เพื่อหาลักษณะของสัญญาณโบลด์โดยใช้แบบจำลองที่เป็นแบบจำลองปริภูมิสถานะ (state space model) ดังนั้นแบบจำลองที่อธิบายข้อมูล fMRI ควรจะนำสัญญาณขาเข้ารวมเข้าไปในแบบจำลองด้วย โครงการนี้ต้องการศึกษาการนำสัญญาณขาเข้ารวมเข้าไปในแบบจำลอง AR จึงได้ปรับปรุงแบบจำลอง AR เป็นแบบจำลองถดถอยตัวเองที่มีสัญญาณเข้าภายนอก (Autoregressive with Exogenous input model หรือแบบจำลอง ARX) แบบจำลอง ARX มีพจน์ของสัญญาณขาเข้าเพิ่มเข้าไปในแบบจำลองดังสมการ (2)

$$y(t) = A_1y(t-1) + \dots + A_p y(t-p) + B_1u(t-1) + \dots + B_q u(t-q) + e(t) \quad (2)$$

เมื่อ y คือสัญญาณขาออก, u คือสัญญาณขาเข้า, e คือสัญญาณรบกวน, A_k เป็นเมทริกซ์ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัญญาณขาออก ณ ปัจจุบันกับในอดีต, B_k เป็นเมทริกซ์ที่แสดงความสัมพันธ์ระหว่างสัญญาณขาออกในปัจจุบันกับสัญญาณขาเข้าในอดีต

การศึกษาความเชื่อมโยงของสมองแต่ละวอกเซลมีความสัมพันธ์กันอย่างไร วิธีการหนึ่งคือการวิเคราะห์ผ่านค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลองที่ใช้อธิบายข้อมูลสมอง ซึ่งวิธีการประมาณค่าพารามิเตอร์เหล่านั้นก็มีหลายวิธีการ วิธีการหนึ่งที่นิยมใช้คือการประมาณค่าแบบกำลังสองต่ำสุด (least squares estimation) เพราะไม่ซับซ้อนและไม่จำเป็นต้องใช้ข้อมูลของสัญญาณรบกวน สภาพการเชื่อมโยงของสมองไม่จำเป็นว่าทุกส่วนของสมองต้องมีความสัมพันธ์กันทั้งหมด วอกเซลหนึ่งอาจจะไม่ส่งผลกับอีกวอกเซลหนึ่งได้ สำหรับแบบจำลอง AR (1) การที่วอกเซลที่ j ไม่ส่งผลต่อวอกเซลที่ i ก็ต่อเมื่อ $(A_k)_{ij} = 0$ ที่ทุกค่า $k = 1, 2, \dots, p$ การประมาณค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลองด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดจะเกิดเหตุการณ์ที่ $(A_k)_{ij} = 0$ ได้ยาก ดังนั้น การหารูปแบบของ $(A_k)_{ij} = 0$ ต้องบังคับให้เกิดโดยการเพิ่มฟังก์ชันลงโทษแบบนอร์ม-1 (ℓ_1 -regularized) ในการประมาณค่าแบบกำลังสองต่ำสุด

โครงการนี้เลือกใช้แบบจำลอง ARX เพื่อศึกษาผลการกระตุ้นภายนอกมีผลต่อการเชื่อมโยงของสมองอย่างไร วิธีการศึกษาประกอบด้วย การเลือกลักษณะของแบบจำลอง การประมาณแบบจำลองด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุด วิเคราะห์ความซับซ้อนของแบบจำลองที่เหมาะสมและวิเคราะห์รูปแบบของ $(A_k)_{ij} = 0$ ด้วยการประมาณแบบจำลองด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดที่เพิ่มฟังก์ชันลงโทษแบบนอร์ม-1 รวมทั้งวิเคราะห์ความถูกต้องของแบบจำลอง โครงการนี้หวังว่าแบบจำลอง ARX สามารถใช้กับข้อมูล fMRI เบื้องบนที่มีการกระตุ้นด้วยการเห็นภาพและการขยับได้

2 ภาพรวมของโครงการ

วัตถุประสงค์

ในโครงการนี้มีวัตถุประสงค์เพื่อ

- เพื่อศึกษาและประยุกต์ใช้แบบจำลองที่เหมาะสมในการเรียนรู้ความเชื่อมโยงของสมองในสถานะถูกกระตุ้นด้วยสิ่งเร้า
- เพื่อพัฒนาวิธีเชิงเลขในรูปแบบโปรแกรมเพื่อแก้ปัญหาการประมาณค่าพารามิเตอร์แบบจำลอง ARX

ขอบเขตของโครงการ

1. โครงการนี้จะพิจารณาแบบจำลองที่รวมตัวแปรสัญญาณขาเข้าที่ทราบค่าในรูปแบบจำลองเชิงเส้น
2. โครงการนี้จะพิจารณาแบบจำลอง ARX และใช้การประมาณพารามิเตอร์กำลังสองต่ำสุด
3. โครงการนี้จะทดสอบแบบจำลองที่นำเสนอขึ้นบนข้อมูลทั้งสังเคราะห์และข้อมูลจริง

ผลลัพธ์ที่คาดหวังจากโครงการ

1. รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่ใช้อธิบายการเชื่อมโยงของสมอง
2. ชุดคำสั่งแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ผ่านโปรแกรม MATLAB

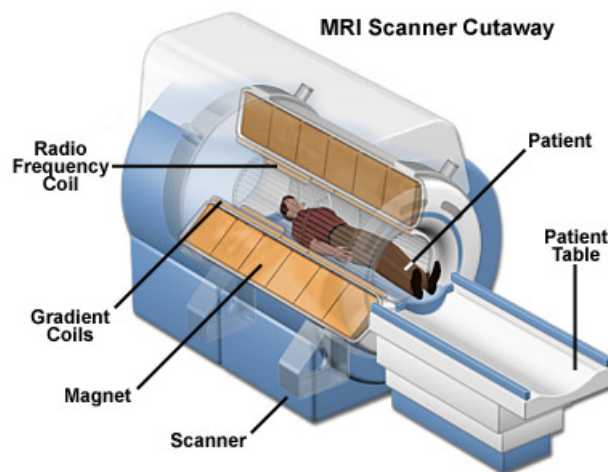
ผลลัพธ์ที่ได้

1. รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่ใช้อธิบายการเชื่อมโยงของสมอง
2. ชุดคำสั่งแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ผ่านโปรแกรม MATLAB
3. ทดสอบความถูกต้องของรูปแบบปัญหาที่ใช้ในการแก้ปัญหาแบบจำลองกับข้อมูลสังเคราะห์

รายละเอียดที่ไม่สามารถทำตามผลลัพธ์ที่คาดหวังเขียนอยู่ในหัวข้อ 7

3 ข้อมูลสมองแบบ fMRI

Functional magnetic resonance imaging (fMRI) เป็นภาพสแกนเกิดจากข้อมูลจากเครื่อง MRI ซึ่งเป็นวิธีหนึ่งที่สามารถวัดการทำงานของสมองได้ ข้อมูล fMRI จะแสดงในรูปแบบของสัญญาณโบลต์

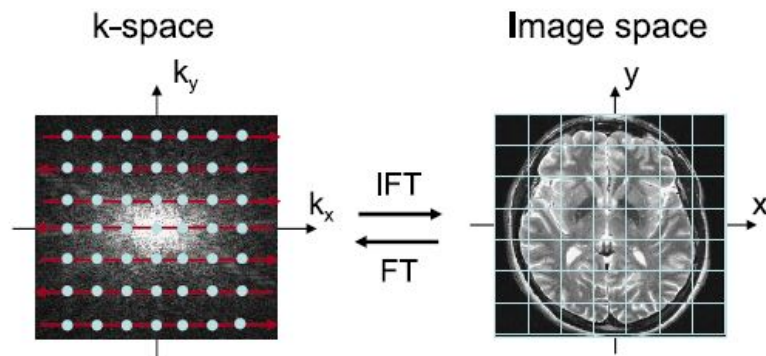


รูปที่ 1: เครื่อง MRI scanner (ตรวจสอบภาพคลิกเข้าไป'MRI'เห็นข้างในรูทันโรค) [1]

3.1 หลักการทำงานของเครื่อง MRI scanner

รูปที่ 1 แสดงโครงสร้างเครื่อง MRI scanner โดยเครื่อง MRI สร้างภาพสแกนโดยการจ่ายสนามแม่เหล็กหลายความถี่เข้าไปในคน เมื่อนิวเคลียสของอะตอมในของเหลวของร่างกายได้รับสนามแม่เหล็กจะเกิดการกำรขึ้น ทำให้เกิดการรับพลังงานและคายพลังงานออกมา ซึ่งพลังงานที่คายออกมานั้นเป็นผลการแปลงฟูเรียร์เพราะเครื่อง MRI ใส่สนามแม่เหล็กในรูปแบบของความถี่ ดังนั้นเมื่อนำค่าพลังงานที่คายออกมาแปลงผลกลับของการแปลงฟูเรียร์จะสามารถสร้างภาพสามมิติได้ ดังแสดงในรูปที่ 2 โดยภาพ fMRI ประกอบไปด้วยวอกเซลหลายวอกเซลรวมกัน วอกเซลเป็นเสมือนจุดภาพ (pixel) ที่อยู่ในรูปภาพสองมิติ แต่ละวอกเซลจะอยู่ในลักษณะของก้อนปริมาตร ข้อมูล fMRI ที่ดันทันขนาดวอกเซลควรเล็กที่สุดและค่าของความถี่ในการดึงข้อมูลควรมีความถี่สูง ซึ่งขึ้นอยู่กับข้อจำกัดของเครื่อง MRI

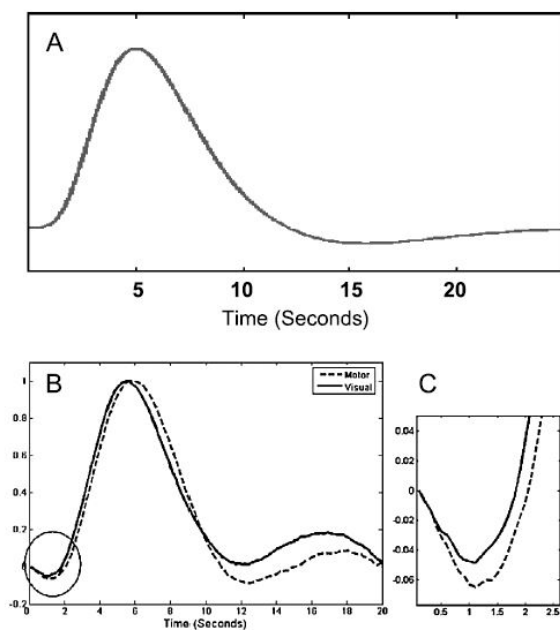
ข้อมูลจากเครื่อง MRI เป็นข้อมูลที่เกิดการประมวลผลทั้งร่างกาย แต่ข้อมูลที่ต้องใช้ในการวิเคราะห์ต้องเป็นข้อมูลที่เกิดจากการทำงานของเซลล์ประสาทในสมองเท่านั้น ดังนั้นจำเป็นต้องแยกเฉพาะสัญญาณของการทำงานในสมองออกมา โดยสมมุติฐานว่า การใช้ออกซิเจนในเซลล์ประสาทสามารถสื่อถึงการทำงานของสมองได้ โดยสัญญาณนั้นเรียกว่าสัญญาณโบลต์ แล้วใช้สัญญาณโบลต์มาวิเคราะห์แทนการวัดทำงานของสมองโดยตรง [2]



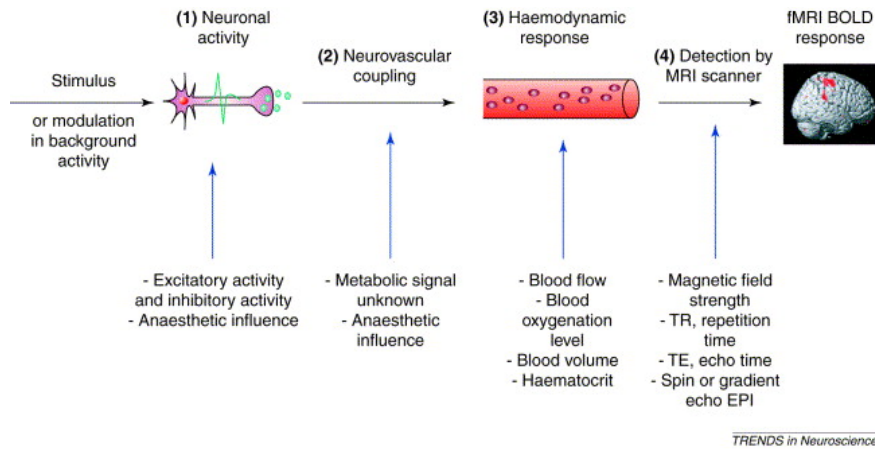
รูปที่ 2: การแปลงฟูเรียร์เพื่อที่จะได้ภาพจากเครื่อง MRI (The Statistical analysis of fMRI data) [2]

3.2 Blood-Oxygen-Level-Dependent (BOLD) signal

สัญญาณโบลต์วัดจากความต่างของออกซิเจนในเลือดได้จากคุณสมบัติทางแม่เหล็กของฮีโมโกลบินในสถานะที่มีออกซิเจน (oxy-hemoglobin) และไม่มีออกซิเจน (deoxyhemoglobin) [2] มีลักษณะเป็น diamagnetic และ paramagnetic ต่างกันตามลำดับ ความแตกต่างของสัญญาณโบลต์ในสถานะที่มีและไม่มีออกซิเจนแสดงได้ดังรูปที่ 3 ค่าของสัญญาณ BOLD นั้นมีความสัมพันธ์กับการทำงานของระบบประสาท โดยผ่าน Hemodynamic response function (HRF) HRF คือฟังก์ชันถ่ายโอนจากการทำงานของสมองเป็นสัญญาณโบลต์ HRF เป็นไม่เชิงเส้นฟังก์ชัน ตัวอย่างผลตอบสนองของสัญญาณ BOLD ได้แสดงในรูปที่ 4 [2, 7] สัญญาณโบลต์ที่ได้มานั้นโดนรบกวนด้วยสัญญาณที่เกิดจากกลไกอื่นๆในร่างกาย เช่น สัญญาณการหายใจ สัญญาณการเต้นของหัวใจ ในการวิเคราะห์การทำงานของสมองจำเป็นต้องมีการนำสัญญาณรบกวนเหล่านั้นออกก่อนนำเพื่อให้สัญญาณที่ได้แสดงถึงการทำงานของสมองเท่านั้น



รูปที่ 3: ตัวอย่างสัญญาณ BOLD ตัวสัญญาณจะอยู่ในลักษณะคล้ายผลตอบสนองอิมพัลส์ ที่มีความสัมพันธ์ระหว่างการกระตุ้นกับ HRF แต่ว่าจะมีช่วงแรกของกระตุ้นที่จะมีค่าที่ตกลงไปเล็กน้อย [2]



รูปที่ 4: ความสัมพันธ์สัญญาณ BOLD กับการทำงานในระบบประสาท (How well do we understand the neural origins of the fMRI BOLD signal?) [3]

3.3 ประเภทการทดลองของ fMRI

การศึกษาการทำงานของสมองโดยใช้ข้อมูล fMRI มีหลายรูปแบบ ไม่ว่าจะเป็นการศึกษาเพื่อเปรียบเทียบระหว่างคนปกติกับคนที่มีปัญหาเกี่ยวกับสมอง เช่น Alzheimer Parkinson หรือ Autism การศึกษาเกี่ยวกับผลการตอบสนองต่อสิ่งกระตุ้นเช่น การกระตุ้นด้วยการเห็นภาพระหว่างคนที่ผู้ทดลองรู้จักและไม่รู้จัก โดยการทดลอง fMRI สามารถแบ่งเป็น 2 รูปแบบใหญ่คือ resting state fMRI และ task fMRI

3.3.1 Resting state

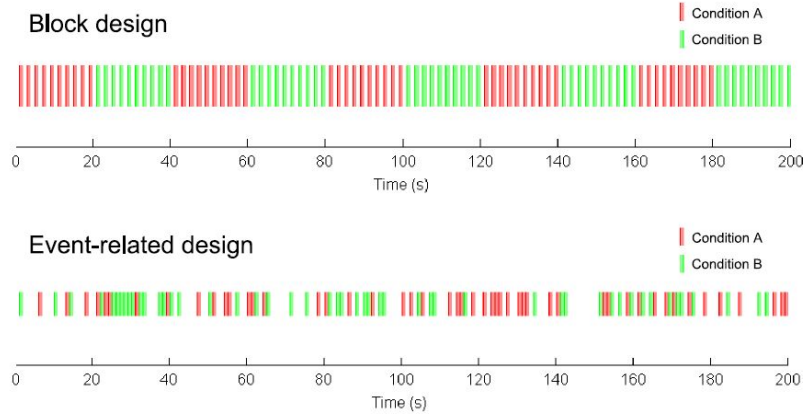
การทดลอง resting state fMRI เป็นการออกแบบการทดลองสำหรับการกระตุ้นที่ไม่สามารถแยกออกจากสภาวะปกติได้อย่างชัดเจน เป็นสิ่งที่เกิดขึ้นเป็นกิจวัตรหรือเกิดขึ้นตามปกติเสมอ เช่น การเปิดปิดตา, การพักนอน เป็นต้น สิ่งที่เกิดขึ้นเหล่านี้จะเกิดขึ้นหลายอย่างพร้อมกันทำให้แยกได้ยากจึงเรียกภาพรวมว่า "resting state" ส่วนใหญ่ใช้ในการศึกษาถึงเกี่ยวข้องของส่วนต่างๆ การทดลองแบบนี้นิยมใช้การวิเคราะห์สภาพการเชื่อมโยงของสมองในรูปแบบ สภาพเชื่อมโยงสมองเชิงฟังก์ชัน (อยู่ในหัวข้อ 4)

3.3.2 Task fMRI

task fMRI เป็นการทดลอง fMRI ที่มีการกระตุ้นด้วยสิ่งเร้าที่ชัดเจน โดยหากต้องการศึกษาความสอดคล้องระหว่างชนิดกับผลการกระตุ้นภายนอก ควรออกแบบให้มีความสอดคล้องกับกิจวัตรประจำวัน การวิเคราะห์รูปแบบนี้จะสามารถประมาณแบบจำลองได้ไม่ยาก แต่ถ้าต้องการออกแบบการทดลองเพื่อที่จะทราบลักษณะของ HRF ต้องออกแบบการทดลองให้ถูกกระตุ้นด้วยสัญญาณที่มีความไม่แน่นอนที่มาก เพื่อที่จะเข้าใจถึงลักษณะของ HRF ได้เนื่องจากสัญญาณขาเข้าที่มีความไม่แน่นอนมากจะสามารถเรียนรู้โครงสร้างของแบบจำลองได้ดีกว่าแต่การประมาณค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลองก็ยากตามไปด้วยการประมาณค่าในแบบจำลองและการเรียนรู้ลักษณะของ HRF เป็นสิ่งที่ต้องคำนึงถึงในการออกแบบการทดลองเสมอ นักประสาทวิทยาส่วนใหญ่ได้ออกแบบการทดลองเป็น 2 รูปแบบหลัก คือ Block design และ event related design [2]

Block design เป็นการออกแบบการทดลองโดยการกระตุ้นที่มีความต่อเนื่อง รูปที่ 5 แสดงตัวอย่างการทดลองแบบ Block design ที่มีการกระตุ้นสองแบบคือ แบบ A และ แบบ B ในการทดลองมีการกระตุ้นแบบ A และแบบ B สลับไปมาในช่วงเวลาที่เท่ากัน การกระตุ้นแต่ละแบบจะแทนด้วยสัญญาณขาเข้าแบบ delta function โดยขนาดของ delta function ขึ้นกับผู้ทดลองกำหนด

Event-related design เป็นการออกแบบการทดลองที่มีการกระตุ้นเป็นแบบสุ่มเชิงเวลา รูปที่ 5 แสดงตัวอย่างการทดลองโดยมีการกระตุ้นสองแบบคือ A และ B โดยทั้งสองเป็นการกระตุ้นแบบสุ่มเชิงเวลา การกระตุ้นแต่ละแบบจะแทนด้วยสัญญาณขาเข้าแบบ delta function โดยขนาดของ delta function ขึ้นกับผู้ทดลองกำหนด ในโครงการงานนี้ใช้ข้อมูล fMRI ที่มีการทดลองแบบ Event-related จะกล่าวละเอียดในหัวข้อ 3.4



รูปที่ 5: การออกแบบการทดลองของ block design และ event-related design block design เป็นการออกแบบสัญญาณขาเข้าที่มีความต่อเนื่องของ delta function และ event-related design ที่การกระจายของ delta function แบบสุ่ม (The Statistical analysis of fMRI data) [2]

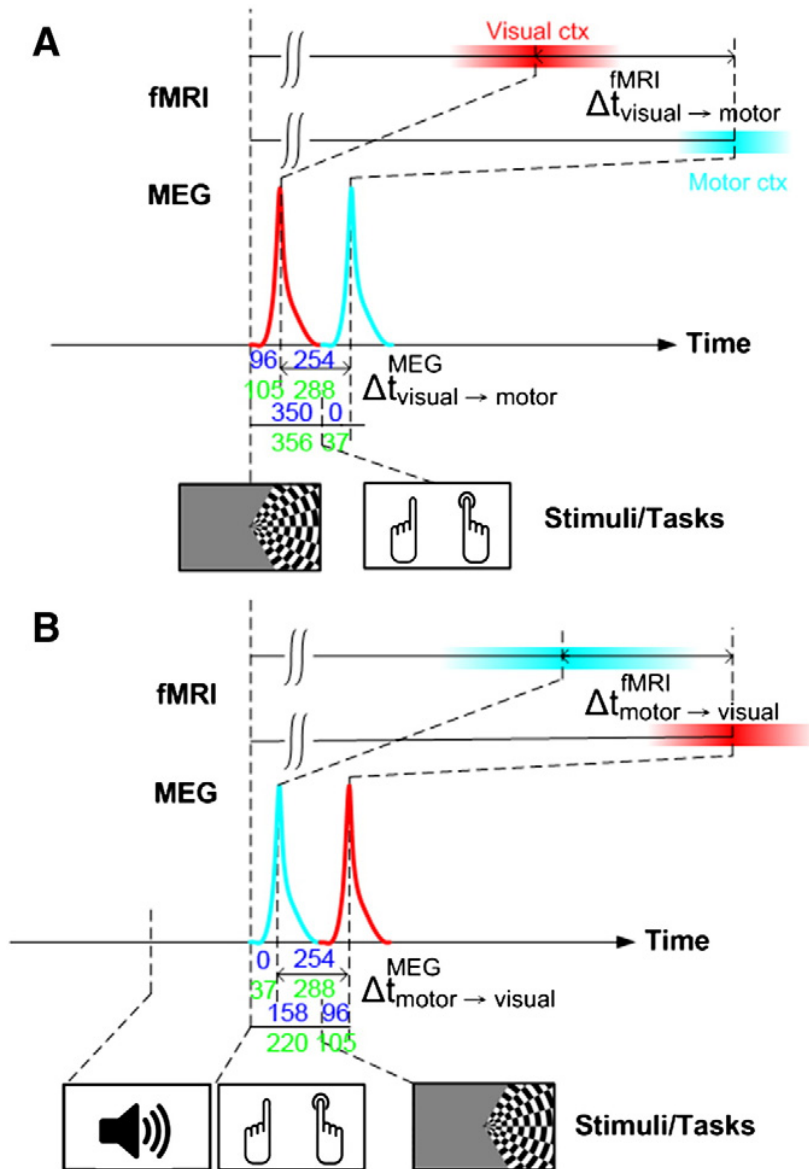
3.4 ตัวอย่างข้อมูล task-fMRI

ข้อมูล fMRI ที่ได้จาก [4] มีรายละเอียดดังนี้ ผู้เข้าร่วมการทดลองเป็นคนที่ถนัดมือขวา สุขภาพดีและมีอายุอยู่ในช่วง 22-30 ปี การทดลองแบ่งเป็น 2 ส่วน มีช่วงเวลาในการทดลองแต่ละส่วนคือ 2400 วินาที และมีการสุ่มตัวอย่างทุก 0.1 วินาที รวม 2400 จุดเวลา

การทดลองแบบแรกเรียกว่าการทดลองแบบ Visual \rightarrow Motor (VM) การทดลองนี้มีการกระตุ้นด้วยการเห็นภาพก่อนจากนั้นให้ผู้เข้าร่วมการทดลองกดปุ่ม โดยทิศทางของการปุ่มกดต้องสอดคล้องกับทิศทางของภาพที่ปรากฏ การกระตุ้นนี้เป็นการสุ่มแบบเอกรูป ในช่วง 4-16 วินาที

การทดลองแบบที่ 2 เป็นการทดลองแบบ Motor \rightarrow Visual (MV) การทดลองนี้จะคล้ายกับการทดลองแบบ VM แต่เริ่มด้วยการได้ยินเสียง เมื่อผู้เข้าร่วมการทดลองได้ยินเสียงหลังจากนั้นจึงกดปุ่ม โดยถ้าผู้เข้าร่วมทดลองได้ยินเสียงที่มีความถี่ 1 KHz ผู้เข้าร่วมการทดลองต้องกดปุ่มทางซ้ายและเห็นภาพปรากฏทางด้านซ้าย และถ้าผู้เข้าร่วมการทดลองได้ยินเสียงที่มีความถี่ 4 KHz ผู้เข้าร่วมการทดลองต้องกดปุ่มทางขวาหลังจากเห็นภาพปรากฏทางด้านขวา การกระตุ้นนี้เป็นการสุ่มแบบเอกรูป ช่วงเวลา 4-16 วินาที

ค่าของสัญญาณขาเข้าจากข้อมูลดิบถูกกำหนดเป็น 0 เมื่อไม่มีการกระตุ้น, เป็น 1 เมื่อมีการกระตุ้นด้านซ้าย และ เป็น 2 เมื่อมีการกระตุ้นด้านขวา โดยการทดลองแบบ VM สัญญาณขาเข้าคือการกระตุ้นด้วยการเห็นภาพ ซึ่งมีการเก็บข้อมูลการกระตุ้นไว้แล้ว แต่การทดลองแบบ MV เป็นการกระตุ้นด้วยเสียง ซึ่งไม่มีข้อมูลจึงมีการสมมุติว่าผู้เข้าร่วมการทดลองจะกดทันทีที่ได้ยินเสียงแล้วใช้ข้อมูลการกดแทน ในการประมาณสภาพการเชื่อมโยงของสมองโดยผ่านแบบจำลองถดถอยตัวเองแบบมีสัญญาณเข้าภายนอก เราสามารถออกแบบสัญญาณขาเข้าของแบบจำลองได้ว่าจะมีขนาดเป็นเท่าไร โดยมีรูปแบบที่ควรเลือกอยู่ 2 รูปแบบ รูปแบบแรกคือ u เป็นสเกลาร์ ค่า u เป็น 0 หมายความว่าไม่มีการกระตุ้นภายนอก มีค่าเป็น 1 เมื่อมีการกระตุ้นทางด้านซ้ายและมีค่าเป็น -1 เมื่อมีการกระตุ้นทางด้านขวา การออกแบบการทดลองนี้มีข้อดีคือแบบจำลองที่ใช้จะไม่มีค่าความซับซ้อนและเป็นรูปแบบที่ง่ายที่สุดในแบบจำลอง ARX แต่แบบจำลองนั้นมีความลำบากในการแยกการกระตุ้นทางซ้ายและขวาให้ผลที่แตกต่างกันอย่างไร รูปแบบที่ 2 คือ u เป็นเวกเตอร์ u มีค่า $[0 \ 0]^T$ เมื่อไม่มีสัญญาณกระตุ้น มีค่าเป็น $[1 \ 0]^T$ เมื่อมีการกระตุ้นจากทางด้านซ้ายและ $[0 \ 1]^T$ เมื่อมีการกระตุ้นจากทางด้านขวา จะเห็นว่าถ้าออกแบบว่า u เป็นเวกเตอร์มีข้อเสียคือความซับซ้อนในแบบจำลองเพิ่มขึ้น จำนวนของพารามิเตอร์ในแบบจำลองเพิ่มขึ้น ทำให้การประมาณแบบจำลองนั้นมีความลำบากเพราะขนาดของ B ต้องใหญ่ขึ้น แต่มีข้อดีคือจะสามารถเห็นผลของสัญญาณจากด้านขวาและด้านซ้ายได้ชัดเจนว่า การกระตุ้นแต่ละแบบส่งผลต่อออกเซลใดบ้าง



รูปที่ 6: A:การทดลองแบบ VM, B:การทดลองแบบ MV (fMRI hemodynamics accurately reflects neuronal timing in the human brain measured by MEG) [4]

4 สภาพเชื่อมโยงของสมองและโครงสร้างเชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์

การวิเคราะห์สภาพเชื่อมโยงของสมองเป็นการวิเคราะห์ความสัมพันธ์ของส่วนต่างๆ ในสมอง สามารถแบ่งได้เป็น 3 ประเภท คือสภาพเชื่อมโยงเชิงโครงสร้าง (structural connectivity), สภาพเชื่อมโยงเชิงฟังก์ชัน (functional connectivity) และสภาพเชื่อมโยงเชิงประสิทธิภาพ (effective connectivity) [8] ในหัวข้อนี้จะอธิบายเพียงการศึกษาสภาพเชื่อมโยงเชิงฟังก์ชันและเชิงประสิทธิภาพ เนื่องจากสภาพเชื่อมโยงเชิงโครงสร้างเป็นการวิเคราะห์การเชื่อมโยงของเซลล์ประสาทในสมองเท่านั้น [8, 9, 10] และผลการศึกษาสภาพเชื่อมโยงเชิงโครงสร้างพบว่าการทำงานของสมองบริเวณที่ใกล้กันไม่จำเป็นต้องทำงานพร้อมกัน [8, 9]

สภาพเชื่อมโยงสมองเชิงฟังก์ชันคือการใช้ค่าทางสถิติวิเคราะห์การเชื่อมโยงของสมอง [9] เช่น ค่า Cross covariance, ค่า Pearson Correlation coefficient, ค่า Partial Correlation ตัวอย่างเช่น การใช้สภาพเชื่อมโยงเชิงฟังก์ชันของ Zhang และคณะ [11] Zhang และคณะได้วิเคราะห์ระหว่างคนปกติกับผู้ป่วยอัลไซเมอร์ โดยมีสมมุติฐานว่าผู้ป่วยอัลไซเมอร์ มีความผิดปกติในส่วนของสมอง Zhang และคณะสามารถแยกคนปกติกับคนที่เป็นอัลไซเมอร์ได้โดยผ่านการวิเคราะห์สภาพเชื่อมโยงเชิงฟังก์ชัน การวิเคราะห์ผ่านสภาพเชื่อมโยงสมองเชิงฟังก์ชันใช้ได้ ณ เวลาใดเวลาหนึ่งเท่านั้น เมื่อเวลาผ่านไปผลการวิเคราะห์สภาพเชื่อมโยงสมองฟังก์ชันอาจจะเปลี่ยนไปได้

สภาพเชื่อมโยงสมองเชิงประสิทธิภาพ เป็นการอธิบายการเชื่อมโยงของสมองโดยใช้สมการพลวัตและวิเคราะห์ผ่านพารามิเตอร์แบบจำลองที่เลือกใช้อธิบาย ความซับซ้อนของการวิเคราะห์สภาพเชื่อมโยงสมองเชิงประสิทธิภาพขึ้นกับลักษณะแบบจำลองที่

เลือกใช้และวิธีการประมาณค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลอง หนึ่งในแบบจำลองที่ใช้ในการวิเคราะห์สภาพเชื่อมโยงสมองเชิงประสิทธิภาพคือ Granger Causal Modeling ซึ่งเป็นการสร้างแบบจำลองที่มีโครงสร้างเชิงสาเหตุในแบบจำลองเชิงเส้นและมีเงื่อนไขของความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ (Granger causality) [8, 12]

Granger Causal Modeling (GCM) เป็นการสร้างแบบจำลองเชิงเส้นจากข้อมูลอนุกรมเวลา แบบจำลองที่สร้างมีโครงสร้างเชิงสาเหตุ แบบจำลองที่มีโครงสร้างเชิงสาเหตุหมายความว่าค่าของสัญญาณในแบบจำลอง ในปัจจุบันขึ้นกับค่าของสัญญาณในอดีตเท่านั้น แบบจำลองเชิงเส้นที่มีโครงสร้างเชิงสาเหตุอย่างง่ายคือแบบจำลอง AR ดังสมการ

$$y(t) = A_1y(t-1) + A_2y(t-2) + \dots + A_p y(t-p) + e(t) \quad (3)$$

Granger Causal Modeling เป็นการสร้างแบบจำลองเชิงเส้นที่ไม่ได้มีแค่มีโครงสร้างเชิงสาเหตุเท่านั้น แต่ต้องมีเงื่อนไขของความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์เข้าไปด้วย ความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์มีแนวคิดอย่างง่ายว่า ถ้าค่าของ y มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุกับ x จะได้ว่าค่า y ในอดีตจะช่วยในการคำนวณค่า x ในปัจจุบันได้ แต่ถ้าค่า y ไม่มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุกับ x จะได้ว่าค่า y ในอดีตไม่มีส่วนช่วยในหาค่า x ในปัจจุบัน [12] การประยุกต์ใช้การให้เหตุผลแบบเกรนเจอร์เข้าไปในแบบจำลองขึ้นกับลักษณะของแบบจำลองว่าเป็นแบบใด ในโครงงานนี้ได้ใช้แบบจำลองถดถอยตัวเองแบบมีสัญญาณขาเข้าภายนอก จะได้ผลลัพธ์ว่า ถ้าค่าของ y_j ไม่มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุแบบเกรนเจอร์กับ y_i พารามิเตอร์ $(A_k)_{ij}$ เป็นดังสมการ

$$(A_k)_{ij} = 0, \quad \forall k = 1, 2, \dots, p$$

การประมาณแบบจำลอง AR ตามสมการ (3) ที่แสดงให้เห็นถึงรูปแบบเกรนเจอร์ สามารถทำได้โดยใช้รูปแบบปัญหาที่เพิ่มฟังก์ชันลงโทษแบบ ℓ_1 (สามารถอ่านได้ใน [13])

5 รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX

แบบจำลองถดถอยตัวเองแบบมีสัญญาณขาเข้าภายนอก (Autoregressive model with exogenous inputs หรือแบบจำลอง ARX) เป็นแบบจำลองที่มีความคล้ายกับแบบจำลองถดถอยตัวเอง (Autoregressive model หรือแบบจำลอง AR) แต่มีการเพิ่มส่วนของสัญญาณขาเข้าไปในระบบ โดยโครงงานนี้ได้ใช้แบบจำลองแบบ ARX เนื่องจาก

1. แบบจำลอง ARX เป็นแบบจำลองเชิงเส้นทำให้ง่ายต่อการคำนวณ
2. โครงงานนี้มีสมมุติฐานที่ว่าเมื่อมีการกระตุ้นภายนอกทำให้แบบจำลองอธิบายพลวัตของสมการได้ดีกว่า

แบบจำลอง ARX มีสมการทั่วไปว่า

$$y(t) = \sum_{i=1}^p A_i y(t-i) + \sum_{j=1}^r B_j u(t-j) + v(t) \quad (4)$$

โดย $y \in \mathbb{R}^q$, $u \in \mathbb{R}^m$, $A_i \in \mathbb{R}^{q \times q}$, $B_j \in \mathbb{R}^{q \times m}$ และ $v \in \mathbb{R}^q$ เมื่อ y คือสัญญาณโพลต์ในแต่ละวอกเซล, u คือสัญญาณกระตุ้นภายนอก, v คือสัญญาณรบกวน, p คืออันดับของการถดถอยของตัวเอง, r คืออันดับการถดถอยของสัญญาณขาเข้า

5.1 รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองที่ไม่มีเงื่อนไขเกรนเจอร์

วิธีที่นิยมใช้ในการประมาณแบบจำลองคือวิธีกำลังสองต่ำสุด (least squares estimation) เนื่องจากเป็นวิธีที่ง่ายและมีผลเฉลยที่ชัดเจน เมื่อประยุกต์วิธีกำลังสองต่ำสุดนี้มาใช้ในการประมาณแบบจำลองแบบจำลอง ARX ปัญหาสามารถเขียนออกมาได้ว่า

$$\underset{A, B}{\text{minimize}} \quad (1/2) \left(\sum_{t=p+1}^N \left\| y(t) - \sum_{j=1}^p A_j y(t-j) - \sum_{j=1}^r B_j u(t-j) \right\|_2^2 \right) \quad (5)$$

เมื่อมีข้อมูล $y(1), y(2), \dots, y(N), u(1), u(2), \dots, u(N)$ แล้วเราจะสามารถจัดรูปใหม่ได้ดังนี้

$$\begin{aligned} Y &= [y(p+1) \ y(p+2) \ y(p+3) \ \dots \ y(N)] \\ A &= [A_1 \ A_2 \ \dots \ A_p] \\ B &= [B_1 \ B_2 \ \dots \ B_r] \\ H &= \begin{bmatrix} y(p) & y(p+1) & y(p+2) & \dots & y(N-1) \\ y(p-1) & y(p) & y(p+1) & \dots & y(N-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ y(1) & y(2) & y(3) & \dots & y(N-p) \end{bmatrix} \\ K &= \begin{bmatrix} u(p) & u(p+1) & u(p+2) & \dots & u(N-1) \\ u(p-1) & u(p) & u(p+1) & \dots & u(N-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u(p-r+1) & u(p-r+2) & u(p-r+3) & \dots & u(N-r) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (6)$$

ดังนั้นปัญหา (5) จัดรูปใหม่ได้ดังนี้

$$\underset{A,B}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|Y - AH - BK\|_F^2 \quad (7)$$

กำหนดให้

$$\theta = [A \ B], L = \begin{bmatrix} H \\ K \end{bmatrix}$$

ปัญหา (5) สามารถเปลี่ยนเป็นปัญหา

$$\underset{\theta}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|Y - \theta L\|_F^2 \quad (8)$$

โดยเงื่อนไขที่ทำให้ $(1/2) \|Y - \theta L\|_F^2$ ต่ำที่สุดคืออนุพันธ์อันดับหนึ่งของ $(1/2) \|Y - \theta L\|_F^2$ มีค่าเท่ากับ 0

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\theta} \left((1/2) \|Y - \theta L\|_F^2 \right) &= -(Y - \theta L)L^T \\ \theta^* &= YL^T(LL^T)^{-1} \end{aligned}$$

ปัญหา (8) มีเพียงคำตอบเดียวก็ต่อเมื่อเมทริกซ์ L ต้องเป็นเมทริกซ์เต็มขั้น (full rank)

5.2 รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองที่มีเงื่อนไขเกรนเจอร์

รูปแบบปัญหา (5) เป็นเพียงรูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองโดยไม่สนใจเงื่อนไขของการให้เหตุผลแบบเกรนเจอร์ ปัญหาการประมาณแบบจำลองที่รวมเงื่อนไขของการให้เหตุผลของเกรนเจอร์จะมีลักษณะเหมือนปัญหา (5) แต่ต้องเพิ่มเงื่อนไข $(A_k)_{ij} = 0, \forall k = 1, 2, \dots, p$ ปัญหานี้สามารถเขียนได้ว่า

$$\begin{aligned} \underset{A,B}{\text{minimize}} \quad & (1/2) \|Y - AH - BK\|_F^2 \\ \text{subject to} \quad & (A_1)_{ij} = (A_2)_{ij} = \dots = (A_p)_{ij} = 0 \quad (i, j) \in \mathcal{J} \end{aligned} \quad (9)$$

\mathcal{J} คือเซตของดัชนี (i, j) ของ $A_k, \forall k = 1, 2, \dots, p$ โดยที่ทราบว่า y_j ไม่มีความเกี่ยวข้องเชิงสาเหตุกับ y_i การแก้ปัญห (9) สามารถแก้ด้วยการแทนค่า $(A_k)_{ij} = 0, \forall k = 1, 2, \dots, p$ ในฟังก์ชันจุดประสงค์ของปัญหา (9) เท่านั้นแต่การเขียนคำตอบของรูปแบบปัญหา (9) ให้อยู่ในรูปของผลเฉลยที่ชัดเจน (exact solution) ได้ยาก ดังนั้นจึงได้ทำการเปลี่ยนรูปแบบการคำนวณปัญหา (9) โดยการ vectorization เพื่อเปลี่ยนปัญหาที่อยู่ในรูปแบบเมทริกซ์อยู่ในรูปแบบปัญหาเวกเตอร์ (สามารถดูรายละเอียดได้ในภาคผนวก 11.2) โดยจะทำการ vectorization เมทริกซ์ Y, A, B, H และ K ให้อยู่ในรูปของเวกเตอร์ y_{vec}, G, F, x และ z ปัญหา (9) ที่อยู่ในรูปแบบเวกเตอร์สามารถเขียนได้ว่า

$$\begin{aligned} \underset{x,z}{\text{minimize}} \quad & (1/2) \|y_{\text{vec}} - Gx - Fz\|_2^2 \\ \text{subject to} \quad & x_k = 0 \quad (k \in J) \end{aligned} \quad (10)$$

โดย $Y \xrightarrow{\text{vectorize}} y_{\text{vec}}, (A, B) \xrightarrow{\text{vectorize}} (x, z)$ และ $(H, K) \xrightarrow{\text{vectorize}} (G, F)$, J คือเซตของดัชนี k โดยที่ $x_k = (A_k)_{ij}$ สำหรับ $(i, j) \in \mathcal{J}$ (รายละเอียดการเปลี่ยนรูปปัญหา (9) เป็น (10) สามารถดูได้ในภาคผนวก 11.2) ปัญหา (10) สามารถกำจัดเงื่อนไขของปัญหาโดยการแทนค่า $x_k = 0$ ในฟังก์ชันจุดประสงค์ของปัญหา (10) ทำให้ปัญหา (10) เปลี่ยนรูปเป็น

$$\underset{\tilde{x}, z}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 \quad (11)$$

\tilde{x} คือเวกเตอร์ x ที่นำ x_k ออกสำหรับ $k \in J$, \tilde{G} เป็น G ที่นำหลักที่ k ออก ดังนั้นคำตอบของปัญหา (11) คือ

$$\begin{bmatrix} \tilde{x}^* \\ z^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{G}^T \tilde{G} & \tilde{G}^T F \\ F^T \tilde{G} & F^T F \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \tilde{G}^T \\ F^T \end{bmatrix} y_{\text{vec}}$$

การหาคำตอบของปัญหา (9) สามารถหาได้โดยการเรียงค่า \tilde{x}, z ที่เป็นคำตอบของปัญหา (11) กลับเป็นเมทริกซ์ ปัญหา (11) มีเงื่อนไขว่า $\begin{bmatrix} \tilde{G} & F \end{bmatrix}$ ต้องเป็นเมทริกซ์เต็มขั้น (full rank) เท่านั้น ปัญหา (11) ถึงมีเพียงคำตอบเดียว

5.3 รูปแบบการประมาณแบบจำลองที่บังคับความสัมพันธ์แบบเกรนเจอร์

การประมาณในรูปแบบปัญหา (9) ต้องรู้ถึงเงื่อนไขเกรนเจอร์ในรูปแบบจำลองก่อนถึงจะสามารถแก้ปัญหาได้ แต่ถ้าไม่ทราบถึงเงื่อนไขเกรนเจอร์ในรูปแบบจำลอง เราสามารถหารูปแบบของ $(A_k)_{ij} = 0$ โดยการเพิ่มฟังก์ชันลงโทษในการประมาณ $g(A)$ เข้าไปในฟังก์ชันจุดประสงค์ของการประมาณด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดเพื่อบังคับให้เกิดรูปแบบของค่าศูนย์ในการประมาณแบบจำลอง ปัญหาการประมาณที่เพิ่มฟังก์ชันลงโทษสามารถเขียนเป็น

$$\begin{aligned} & \underset{A, B}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|Y - AH - BK\|_F^2 + \lambda g(A) \\ & \text{subject to} \quad (A_1)_{ij} = (A_2)_{ij} = \dots = (A_p)_{ij} = 0 \quad (i, j) \in \mathcal{J} \end{aligned} \quad (12)$$

โดย $g(A) = \sum_{i \neq j, (i, j) \notin \mathcal{J}} \left\| \begin{bmatrix} (A_1)_{ij} & (A_2)_{ij} & \dots & (A_p)_{ij} \end{bmatrix} \right\|_2^2$ และ $\lambda > 0$ ค่า λ แสดงถึงการถ่วงน้ำหนักของฟังก์ชันลงโทษ $g(A)$ กับฟังก์ชันจุดประสงค์ของการประมาณด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุด ถ้ากำหนดค่า λ ให้มีค่ามาก ค่า $g(A)$ ลดลงอย่างมากและบังคับให้ค่า $(A_k)_{ij} = 0$ ปัญหา (12) เป็นรูปแบบปัญหาที่เรียกว่าปัญหา Group lasso [14] (สามารถดูรายละเอียดได้ในภาคผนวก 11.4)

ปัญหา (12) ดึงค่า $(A_k)_{ij}$ บางค่ามาแทนค่าใน $g(A)$ เท่านั้น เมื่อทำการ vectorization ให้เหมือนกับปัญหา (10) ค่า $(A_k)_{ij}$ จะอยู่ในเวกเตอร์ x และการดึงค่า $(A_k)_{ij}$ บางค่ามาใช้ สามารถเขียนอยู่ในรูปของการคูณกันระหว่างเวกเตอร์ x คูณกันเมทริกซ์ P เช่น $x = [x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ x_5]^T$ แล้วต้องการดึงค่า $[x_2 \ x_5]^T$ โดยคูณเมทริกซ์ P ที่มีค่าเป็น

$$P = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad Px = \begin{bmatrix} x_2 \\ x_5 \end{bmatrix}$$

กำหนดให้ $\|\cdot\|_{2,1}$ เป็นผลบวกของนอร์ม-2 ของ block vector เช่น ถ้า v เป็น block vector ที่สามารถแบ่งได้เป็น $v = (v_1, \dots, v_L)$ แล้ว

$$\|v\|_{2,1} = \sum_{i=1}^L \|v_i\|_2$$

ปัญหา (12) สามารถเขียนเป็นเขียนใหม่อยู่ในรูปแบบของการหาค่าเหมาะสมที่สุดในรูปแบบของเวกเตอร์ได้ว่า

$$\underset{\tilde{x}, z}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 + \lambda \|P\tilde{x}\|_{2,1} \quad (13)$$

การหาค่าเฉลย \tilde{x}^*, z^* ในปัญหา (13) มีปัญหาเพราะว่าฟังก์ชันจุดประสงค์ของรูปแบบปัญหา (13) ไม่สามารถหอนูพันธ์ได้ เพราะฟังก์ชันจุดประสงค์ของปัญหา (13) มีพจน์ $\lambda \|P\tilde{x}\|_{2,1}$ ที่ไม่สามารถหอนูพันธ์ได้ ดังนั้นจึงต้องใช้วิธีการหาค่าเหมาะสมที่สุดสำหรับฟังก์ชันที่ไม่ราบเรียบ เช่น Sub-gradient method หรือ Interior-point methods ในการแก้ปัญหา [15] ในโครงการงานนี้ได้เลือกใช้วิธี Alternating Direction Method of Multipliers หรือ ADMM ในการแก้ปัญหาค่าเหมาะสมที่สุดของปัญหา (13) พร้อมบอกเหตุผลที่เลือกในหัวข้อ 6

6 ขั้นตอนเชิงเลขที่ใช้แก้ปัญหาการประมาณ

รูปแบบปัญหา (13) เป็นปัญหาการหาค่าเหมาะสมสุดแบบคอนเวกซ์ที่ไม่สามารถเขียนอยู่ในรูปของผลเฉลยที่ชัดเจนได้ (exact solution) จึงต้องใช้ขั้นตอนเชิงเลขที่ใช้แก้ปัญหา (13) และปัญหา (13) เป็นปัญหาที่ไม่สามารถหาค่าอนุพันธ์ได้ ดังนั้นขั้นตอนเชิงเลขที่ใช้ในการแก้ปัญหา (13) ต้องใช้ขั้นตอนเชิงเลขสำหรับฟังก์ชันไม่ราบเรียบ ในหัวข้อนี้จะกล่าวถึงขั้นตอนเชิงเลขที่สามารถนำมาใช้ในการแก้ปัญหา (13) ได้

Sub-gradient method

Sub-gradient method เป็นขั้นตอนวิธีเชิงเลขวิธีหนึ่งที่ใช้สำหรับปัญหาการหาค่าเหมาะสมสุดในกรณีที่ไม่สามารถหาค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันจุดประสงค์ได้

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad f(x)$$

โดยที่ $x \in \mathbb{R}^n$ $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ และ $f(x)$ ไม่สามารถหาค่าอนุพันธ์ได้

โดยทั่วไปฟังก์ชันคอนเวกซ์ที่สามารถหาค่าอนุพันธ์อันดับที่หนึ่งได้ ฟังก์ชันนั้นสอดคล้องกับอสมการ (14) สำหรับทุกค่า $x, y \in \text{dom } f$ [15]

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) \quad (14)$$

จากอสมการ (14) สำหรับ $f(x)$ ที่เป็นคอนเวกซ์และไม่สามารถหาค่าอนุพันธ์ได้ แต่ยังคงสอดคล้องกับอสมการ (15) สำหรับ $\forall x, y \in \text{dom } f$

$$f(y) \geq f(x) + g^T(y - x) \quad (15)$$

เรากล่าวว่า g เป็น sub-gradient ของ f ที่จุด x จากอสมการ (15) นิยามของ sub-gradient มีเงื่อนไขที่ครอบคลุมกว่าเกรเดียนต์ $\nabla f(x)$ เราจึงนิยาม Sub-differential $\partial f(x)$ ที่เป็นเซต sub-gradient หรือ $\partial f(x) = \{g | f(y) \geq f(x) + g^T(y - x), \forall y \in \text{dom } f\}$

ขั้นตอนการหาค่าเหมาะสมสุดโดยใช้ Sub-gradient method ทำได้โดย การปรับค่า x

$$x^+ = x - tg(x)$$

เมื่อ x^+ คือค่า x ที่ถูกปรับเรียบร้อยแล้ว, $g(x)$ คือ sub-gradient ที่จุด x และ $t > 0$ คือขนาดในการเดินของเส้นทาง กล่าวคือ ขั้นตอนการปรับค่า x ของ sub-gradient คล้ายกับวิธี gradient descent method แต่ใช้ค่า sub-gradient $g(x)$ แทนค่า $\nabla f(x)$ [15] ความเร็วของการหาค่าตอบด้วยวิธี Sub-gradient method เป็นกระบวนการที่อัตราเร็วในการลู่เข้าสู่ค่าตอบที่ช้า (อัตราเร็วในการลู่เข้าเป็นแบบเชิงเส้น [16]) เมื่อเทียบกับ Interior-point method ที่ใช้การปรับค่าด้วย Newton method (มีอัตราเร็วในการลู่เข้าเป็นแบบกำลังสอง [16])

Interior-point method

Interior-point method เป็นขั้นตอนเชิงเลขที่ใช้สำหรับการแก้ปัญหาการหาค่าเหมาะสมสุดแบบคอนเวกซ์ ที่เขียนในรูปแบบดังนี้ [15]

$$\begin{aligned} &\underset{x}{\text{minimize}} \quad f_0(x) \\ &\text{subject to} \quad f_i(x) \leq 0 \\ &\quad \quad \quad Ax = b \end{aligned} \quad (16)$$

Interior-point method จัดการกับเงื่อนไขอสมการโดยใช้นิยามของฟังก์ชัน logarithmic barrier function ที่มีนิยามว่า logarithmic barrier function ของ $f_i(x)$ คือ $-(1/t) \log(-f_i(x))$ และเปลี่ยนรูปปัญหา (16) ใหม่เป็น

$$\begin{aligned} &\underset{x}{\text{minimize}} \quad f_0(x) - (1/t) \sum_{i=1}^k \log(-f_i(x)) \\ &\text{subject to} \quad Ax = b \end{aligned} \quad (17)$$

สำหรับการแก้ปัญหา (17) เป็นปัญหาการแก้สำหรับค่า t หนึ่งๆ โดยถ้า $t \rightarrow \infty$ คำตอบของปัญหา (17) ลู่เข้าสู่คำตอบของปัญหา (16)

ปัญหา (17) สามารถแก้ด้วยขั้นตอนเชิงเลข Newton method [15] แล้วภายในขั้นตอนเชิงตัวเลข Newton method คือการแก้สมการเชิงเส้น $H\Delta x = -g$ โดยที่ $\Delta x \in \mathbb{R}^n$ เป็นเวกเตอร์ที่บอกถึงทิศทางในการปรับค่า (search direction), $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ เป็นตัวประมาณ Hessian matrix, $g \in \mathbb{R}^n$ เป็นตัวประมาณของเวกเตอร์เกรเดียนต์ ขั้นตอนเชิงเลข Interior-point method เป็นขั้นตอนที่ให้ความถูกต้องของคำตอบสูงแต่ถ้า การแก้สมการ $H\Delta x = -g$ ต้องการคำนวณจำนวน n^3 flops โดยค่า n คือขนาดของตัวแปรเวกเตอร์ในการหาค่าที่เหมาะสมสำหรับรูปแบบปัญหา (13) จะมีค่า $n = q^2p + mqr$ โดย q คือจำนวนวอกเซลในข้อมูล fMRI, m คือขนาดของเวกเตอร์สัญญาณขาเข้า $u(t)$, p คืออันดับของการถดถอยตัวเองในแบบจำลอง ARX, r คืออันดับของการถดถอยของสัญญาณขาเข้าในแบบจำลอง ARX ค่า q ในสำหรับข้อมูลจริงนั้นมีค่าประมาณ 20000 ถึง 30000 วอกเซล ทำให้การรูปแบบปัญหา (13) ด้วยขั้นตอนเชิงเลข Interior-point method ต้องใช้จำนวนครั้งในการคำนวณอย่างมาก เราเปลี่ยนวิธีที่ใช้เป็นขั้นตอนเชิงเลข Alternating Direction Method of Multipliers (ADMM) ในการแก้ปัญหา (13) แก้ปัญหาขนาดใหญ่

Alternating Direction Method of Multipliers

Alternating Direction Method of Multipliers หรือ ADMM เป็นขั้นตอนเชิงเลขหนึ่งในการแก้ปัญหาการหาค่าเหมาะสมแบบคอนเวกซ์ ขั้นตอนเชิงเลข ADMM สามารถใช้ได้เมื่อฟังก์ชันจุดประสงค์สามารถแยกเป็นหลายส่วนได้โดยมีเงื่อนไขสมการเชิงเส้น (equality constraints) ในปัญหาที่รวมกันอยู่ หรือเขียนในรูปของปัญหาการหาค่าเหมาะสมตามปัญหา (18)

$$\begin{aligned} & \underset{x,z}{\text{minimize}} && f(x) + g(z) \\ & \text{subject to} && Ax + Bz = c \end{aligned} \quad (18)$$

โดย $x \in \mathbb{R}^n, z \in \mathbb{R}^m$ เป็นตัวแปรในการหาค่าเหมาะสม ในปัญหา (13) สามารถเขียนในรูปแบบของปัญหา (18)

$$\begin{aligned} & \underset{x_1, x_2, x_3}{\text{minimize}} && f(x_1, x_2) + g(x_3) \\ & \text{subject to} && Px_1 - x_3 = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

โดยที่ $f(x_1, x_2) = (1/2)\|y_{\text{vec}} - \tilde{G}x_1 - Fx_2\|_2^2$ และ $g(x_3) = \lambda\|x_3\|_{2,1}$

ขั้นตอน ADMM เริ่มจากการสร้าง augmented Lagrangian (\mathcal{L}_ρ) เป็นฟังก์ชันของตัวแปร x_1, x_2, x_3 และ u (dual variable) โดยที่ $\rho > 0$

$$\mathcal{L}_\rho(x_1, x_2, x_3, u) = f(x_1, x_2) + g(x_3) + u^T(Px_1 - x_3) + (\rho/2)\|Px_1 - x_3\|_2^2$$

การสร้าง \mathcal{L}_ρ เป็นการจัดการเงื่อนไขสมการเชิงเส้นที่อยู่ในปัญหา (19) ในรูปแบบของฟังก์ชันลงโทษแบบนอร์ม-2 กล่าวคือเมื่อปรับค่า ρ ให้มีค่ามาก การหาค่าต่ำสุดของ \mathcal{L}_ρ จึงลงโทษให้ $Px_1 \simeq x_3$

วิธี ADMM เป็นวิธีการหาค่าตอบเชิงเลขที่ปรับค่า x_1, x_2, x_3, u การปรับค่า x_1, x_2, x_3, u ที่ละตัวสลับกันไป ในการปรับค่าแต่ละตัวทำให้ค่า \mathcal{L}_ρ ต่ำสุดเมื่อตัวแปรอื่นที่ไม่ใช่ตัวแปรที่ปรับค่าเป็นค่าคงที่ เช่น การปรับค่า x_3 ต้องปรับค่าให้ \mathcal{L}_ρ ต่ำที่สุดโดยให้ตัวแปร x_1, x_2, u คงที่ สำหรับรูปแบบปัญหา (13) มีขั้นตอนดังนี้

$$\begin{aligned} (x_1^+, x_2^+) &= \underset{x_1, x_2}{\text{argmin}}(f(x_1, x_2) + u^T(Px_1 - x_3) + (\rho/2)\|Px_1 - x_3\|_2^2) \\ x_3^+ &= \underset{x_3}{\text{argmin}}(g(x_3) + u^T(Px_1^+ - x_3) + (\rho/2)\|Px_1^+ - x_3\|_2^2) \\ u^+ &= u + \rho(Px_1^+ - x_3^+) \end{aligned}$$

การปรับค่าจะหยุดวนซ้ำเมื่อ

$$\|r^k\|_2 \leq \epsilon^{\text{pri}} \quad \text{และ} \quad \|s^k\|_2 \leq \epsilon^{\text{dual}}$$

โดย r^k คือความผิดพลาดของเงื่อนไขสมการเชิงเส้นในปัญหา (19), s^k คือความผิดพลาดของเงื่อนไขสมการเชิงเส้นในคู่กันกับปัญหา (19), ϵ^{pri} คือความผิดพลาดที่ยอมรับได้ของปัญหาคู่กันกับปัญหา (19) และ ϵ^{dual} คือความผิดพลาดที่ยอมรับได้ของปัญหา (19) วิธี ADMM ไม่ได้ทำให้ $Px_1 = x_3$ เพียงแค่ทำให้ $Px_1 \simeq x_3$ หรือลดความถูกต้องของคำตอบของปัญหาทาง แต่ถ้าวสามารถแยกฟังก์ชันจุดประสงค์ของปัญหา ADMM ที่ทำให้แต่ละการปรับค่า x_1^+, x_2^+, x_3^+, u^+ สามารถหาผลเฉลยที่ชัดเจน (analytical solution) ได้ ขั้นตอนเชิงเลข ADMM จะแก้ปัญหาได้รวดเร็ว เราจึงเลือกใช้วิธีนี้ในการแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลอง (รายละเอียดขั้นตอนเชิงเลข ADMM สามารถดูได้ในหัวข้อ 11.3)

7 ผลลัพธ์ของโครงการงาน

ผลลัพธ์ที่คาดหวังจากโครงการงาน

1. รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่ใช้อธิบายการเชื่อมโยงของสมอง
2. ชุดคำสั่งแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ผ่านโปรแกรม MATLAB

ขอบเขตของโครงการงาน

1. โครงการงานนี้จะพิจารณาแบบจำลองที่รวมตัวแปรสัญญาณขาเข้าที่ทราบค่าในรูปแบบจำลองเชิงเส้น
2. โครงการงานนี้จะพิจารณาแบบจำลอง ARX และใช้การประมาณพารามิเตอร์กำลังสองต่ำสุด
3. โครงการงานนี้จะทดสอบแบบจำลองที่นำเสนอขึ้นบนข้อมูลที่สังเคราะห์และข้อมูลจริง

ผลลัพธ์ที่ได้

1. รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่ใช้อธิบายการเชื่อมโยงของสมอง
2. ชุดคำสั่งแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ผ่านโปรแกรม MATLAB
3. ทดสอบความถูกต้องของรูปแบบปัญหาที่ใช้ในการแก้ปัญหาแบบจำลองกับข้อมูลสังเคราะห์

ส่วนที่ไม่ได้ทำตามผลลัพธ์ที่คาดหวังคือการใช้รูปแบบปัญหาในการประมาณแบบจำลองกับข้อมูล fMRI เหตุผลที่ไม่ได้เพราะว่าเสียเวลาในออกแบบโปรแกรมในการแก้ปัญหาที่ต้องสามารถคำนวณสำหรับข้อมูลจริงเมื่อจำนวนตัวแปรมีจำนวนมาก เนื่องจากข้อมูล fMRI จริงอยู่มีจำนวนวอกเซลอยู่ประมาณ 20000 ถึง 30000 วอกเซล ทำให้ต้องออกแบบโปรแกรมในการทำงานได้เมื่อจำนวนตัวแปรมีจำนวนมาก (จำนวนตัวแปรมากกว่า 400 ล้านตัว) นอกจากนี้ข้อมูล fMRI ที่จะใช้ศึกษาต้องผ่านการ pre-process หลายขั้นตอนมากและไม่สามารถศึกษาขั้นตอนเหล่านั้นได้ในเวลาที่มี

8 ผลการทดลอง

ข้อมูล fMRI ที่ใช้ในโครงการงานเป็นข้อมูล fMRI ที่มีการกระตุ้นด้วยสิ่งเร้าภายนอก เป็นเหมือนระบบที่มีสัญญาณขาเข้าภายนอกมากกระตุ้นให้เกิดพลวัต ในการสร้างแบบจำลองเพื่อประมาณระบบ การใช้แบบจำลองที่พิจารณาถึงสัญญาณขาเข้าควรจะได้ผลการประมาณที่ดีกว่าแบบจำลองที่ไม่พิจารณาถึงสัญญาณขาเข้า เราจึงนำเสนอถึงการเปรียบเทียบระหว่างการใช้แบบจำลอง ARX เทียบกับ AR สำหรับข้อมูลที่สมมติจากระบบที่มีการกระตุ้น

ในหลักการของการหาเอกลักษณ์ของระบบ (System Identification) การที่จะเรียนรู้โครงสร้างของระบบได้นั้นขึ้นกับ ระดับการกระตุ้นที่คงอยู่นาน (Persistent excitation) ของสัญญาณขาเข้า ยิ่งระดับของการกระตุ้นที่สูง ทำให้สัญญาณขาเข้าสามารถกระตุ้นระบบได้หลายโหมด ทำให้สัญญาณขาออกของระบบที่วัดได้แสดงพลวัตของระบบได้ดี ในมุมมองของโดเมนความถี่ สัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงคือสัญญาณขาเข้าที่มีแบนด์วิดท์ที่กว้าง ยิ่งแบนด์วิดท์ของสัญญาณขาเข้ากว้างเท่าไร พลวัตของระบบก็ถูกกระตุ้นออกมาให้เห็นตามความถี่ที่เกิดขึ้นในสัญญาณขาเข้า ยกตัวอย่างเช่น ถ้าสัญญาณขาเข้าของระบบเป็น white noise (แบนด์วิดท์เท่ากับอนันต์) ระบบจะถูกกระตุ้นในทุกความถี่ที่ระบบสามารถทำงานได้ แต่อย่างไรก็ตามการใช้แบบจำลอง ARX กับข้อมูลการทดลอง fMRI ทั่วไปนั้น ระดับการกระตุ้นมีเพียงประมาณ 2 % เมื่อเทียบกับจุดเวลา (ค่า 2 % เทียบจากข้อมูลใน [4] ที่มีข้อมูลทั้งหมด 2400 จุดเวลาแต่มีจำนวนจุดเวลาที่ถูกระตุ้นเพียง 48 จุดเวลา) ดังนั้นจึงมีการทดลองเพื่ออธิบายถึงระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่มีผลต่อการประมาณแบบจำลอง

การทดลองจะแบ่งออกเป็น 2 ส่วนเพื่อทดสอบสมมุติฐานที่ว่า

1. สำหรับการอธิบายพลวัตของข้อมูลดังกล่าว การเลือกใช้แบบจำลอง ARX เหมาะสมกว่าการใช้แบบจำลอง AR
2. สำหรับการอธิบายพลวัตของข้อมูลดังกล่าว ข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงย่อมให้ผลการประมาณดีกว่าข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นที่ต่ำ

ผลการทดลองที่ตอบสนองมาตรฐาน คือ

1. การเปรียบเทียบผลการประมาณกับข้อมูลที่เกิดจากระบบที่มีสัญญาณกระตุ้นด้วยแบบจำลอง AR และ ARX โดยใช้ตัวชี้วัดดังนี้
 - ผลการประมาณของรูปแบบเกรนเจอร์
 - ผลการประมาณความผิดพลาดแบบจำลองในส่วนของ การถดถอยตัวเอง
2. การเปรียบเทียบผลการประมาณแบบจำลอง ARX กับข้อมูลที่เกิดจากระบบการกระตุ้นที่ต่างกัน โดยใช้ตัวชี้วัดดังนี้
 - ความผิดพลาดการประมาณพารามิเตอร์ในแบบจำลอง
 - ความถูกต้องของรูปแบบเกรนเจอร์บนแบบจำลอง
 - ความถูกต้องของอันดับแบบจำลอง

8.1 การเปรียบเทียบผลการประมาณกับข้อมูลที่เกิดจากระบบที่มีสัญญาณกระตุ้นด้วยแบบจำลอง AR และ ARX

การทดลองนี้ต้องการอธิบายถึงการใช้แบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX สำหรับระบบที่สมมติว่าถูกกระตุ้นด้วยสัญญาณขาเข้า การทดลองนี้มีทั้งหมด 4 ขั้นตอน ขั้นตอนแรกคือสร้างแบบจำลองสังเคราะห์ขึ้นมาเป็นแบบจำลอง ARX ที่เป็นตัวแทนของระบบจริงที่มีโครงสร้างเป็น $q = 10, p = 2, m = 1$ และ $r = 1$ แบบจำลองที่สร้างขึ้นมีลักษณะพิเศษคือค่าที่อยู่ใน A_k มี 40 % มิไม่เป็นศูนย์ ขั้นตอนที่ 2 สร้างอนุกรมเวลาจากสัญญาณขาเข้า $u(t)$ และสัญญาณรบกวน 500 จุดเวลา ทั้งหมด 30 ชุดโดยที่ $u(t)$ มีค่าเพียง 3 ค่า คือ $-1, 0, 1$ และสัญญาณรบกวนมีรูปแบบเป็น $e \sim \mathcal{N}(0, 0.01)$ ขั้นตอนที่ 3 ประมาณแบบจำลองโดยรูปแบบปัญหาการประมาณที่บ่งชี้รูปแบบของเกรนเจอร์ (12) (กรณีของแบบจำลอง AR รูปแบบปัญหา (12) ค่า $K = 0$) และขั้นสุดท้ายคือเปรียบเทียบผลที่ได้จากแบบจำลอง ARX และ AR

8.1.1 ผลการประมาณของรูปแบบเกรนเจอร์

การทดลองนี้ต้องการศึกษาการหารูปแบบเกรนเจอร์ที่ได้จากการประมาณแบบจำลองว่าตรงกับระบบจริงที่สร้างขึ้นเพียงใด หรือหมายความว่ารูปแบบของค่าศูนย์ที่อยู่ใน A_k ที่ได้มาจากการประมาณแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX มีรูปแบบของค่าศูนย์ตรงกับรูปแบบของศูนย์ในระบบจริงมากขนาดไหน โดยค่า λ ที่เลือกจะอยู่ในช่วงของ $(0, \lambda_c)$ มาทั้งหมด 100 ค่าแล้วใช้แก้ปัญหา (12) (λ_c คือค่า λ ที่ทำให้ค่า \hat{A} ที่ประมาณจากปัญหา (12) มีค่า 0 เมทริกซ์มากที่สุดเท่าที่เป็นไปได้ ขั้นตอนการคำนวณค่า λ_c อยู่ในภาคผนวกหัวข้อ 11.4) ผลการทดลองนี้จะแสดงออกมาในลักษณะกราฟของ ROC และกราฟจำนวนตำแหน่งที่หารูปแบบเกรนเจอร์ที่ผิดพลาดเปรียบเทียบกับค่า λ

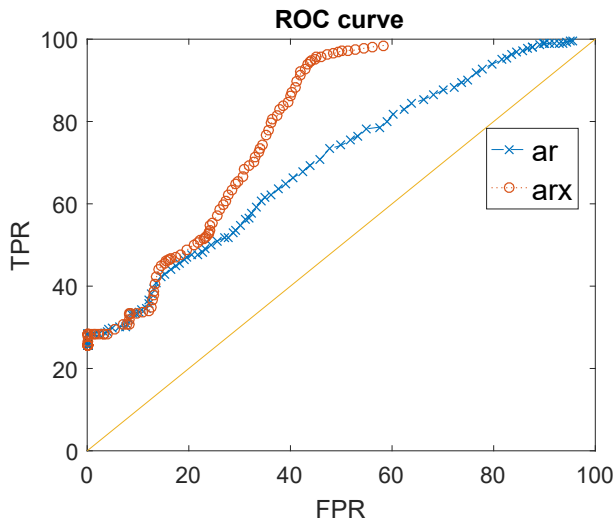
Receiver operating characteristic กราฟ ROC เป็นกราฟที่แสดงความสามารถในการจำแนกข้อมูลแบบทวิภาค (binary classification) ในที่นี้หมายถึงผลการประมาณพารามิเตอร์ A_k ว่าตำแหน่งที่ประมาณออกมาเป็นค่าเป็นศูนย์หรือไม่เป็นศูนย์ถูกต้องหรือไม่ หรือ รูปแบบความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ของแบบจำลองประมาณมาได้มีความสอดคล้องกับระบบจริงหรือไม่ ตำแหน่งที่ค่าไม่เป็นศูนย์จะแทนด้วยสัญลักษณ์ + และตำแหน่งที่มีค่าเป็นศูนย์แทนด้วยสัญลักษณ์ - ค่าที่ใช้ในการคำนวณในกราฟ ROC มีทั้งหมด 4 ค่าคือ True positive, True negative, False positive และ False negative

- True positive : จำนวนพารามิเตอร์ที่มีค่าไม่เป็นศูนย์ตรงกับค่าที่เกิดขึ้นในระบบจริง
- True negative : จำนวนพารามิเตอร์ที่มีค่าเป็นศูนย์ตรงกับค่าที่เกิดขึ้นในระบบจริง
- False positive : จำนวนพารามิเตอร์ที่ประมาณว่ามีค่าไม่เป็นศูนย์แต่ในระบบจริงมีค่าเป็นศูนย์
- False negative : จำนวนพารามิเตอร์ที่ประมาณว่ามีค่าเป็นศูนย์แต่ค่าในระบบจริงมีค่าไม่เป็นศูนย์

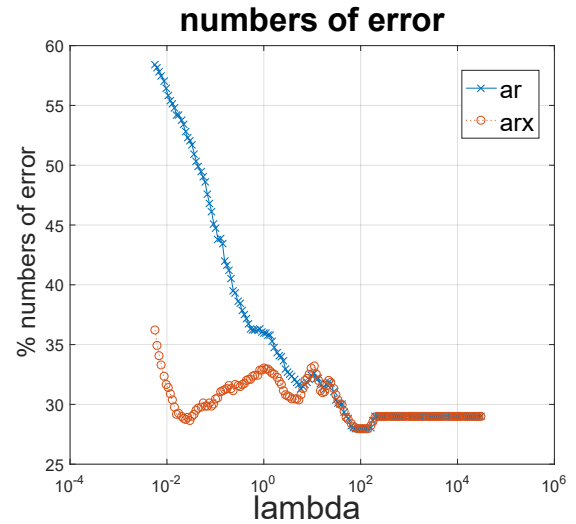
กราฟ ROC เปรียบเทียบค่าระหว่าง TPR (true positive rate) ที่คำนวณจาก $TP/(TP+FN)$ และ FPR (false positive rate) ที่คำนวณจาก $FP/(FP+TN)$ สำหรับวิธีการจำแนกกลุ่มที่ดีควรให้ค่า TPR สูงและ FPR ต่ำ

ตาราง 1: ตารางแสดงถึงการจำแนกกลุ่มข้อมูลของผลลัพธ์ที่ได้กับการแบ่งกลุ่มที่เกิดขึ้นจริง ในตารางใช้สัญลักษณ์ + แทนด้วยตำแหน่งที่มีค่าไม่เป็นศูนย์และ - แทนตำแหน่งที่มีค่าเป็นศูนย์

		predicted condition		total
		+	-	
true condition	+	True Positive (TP)	False Negative (FN)	TP+FN
	-	False Positive (FP)	True Negative (TN)	FP+TN
total		TP+FP	FN+TN	



(a) กราฟ ROC ของการหารูปแบบเกรนเจอร์ของแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX



(b) แสดงจำนวนตำแหน่งของรูปแบบเกรนเจอร์ที่ทำนายผิดพลาดผลการประมาณของแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX

รูปที่ 7: ผลการประมาณรูปแบบเกรนเจอร์สำหรับแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX โดยใช้รูปแบบปัญหา (12) ที่ค่า λ ต่างกัน

สมมุติฐาน การทดลองนี้มีสมมุติฐานว่าแบบจำลอง ARX จะสามารถทำนายรูปแบบเกรนเจอร์ได้ดีกว่าแบบจำลอง AR ในแง่ของจำนวนความถูกต้องในการจำแนก (ดูจากกราฟในรูปที่ 7b ว่ากราฟเส้นไหนลงมีค่าต่ำสุดที่ต่ำกว่ากัน) และโอกาสที่จำแนกได้อย่างถูกต้อง (ดูจากกราฟในรูปที่ 7a ว่าค่าไหนให้อัตราส่วนระหว่าง TPR/FPR สูงกว่า)

ผลลัพธ์ จากกราฟ ROC ในรูปที่ 7a เห็นว่าแบบจำลอง ARX และแบบจำลอง AR มีค่า λ ที่ทำให้ค่าที่อยู่บนกราฟ ROC อยู่มุมบนซ้ายที่หมายถึงค่าที่ให้อัตราส่วนระหว่าง TPR/FPR ได้อัตราส่วนที่สูงที่สุด จะเห็นว่า ค่าที่ได้จากแบบจำลอง AR มุมบนซ้ายสุดอยู่ต่ำกว่าค่าที่ได้ของแบบจำลอง ARX แสดงถึงการใช้แบบจำลอง ARX ในการแบ่งกลุ่มได้ดีกว่าแบบจำลอง AR และกราฟจำนวนตำแหน่งที่ทำนายผิดพลาดในรูปที่ 7b จะเห็นว่าค่าจำนวนตำแหน่งที่ทำนายผิดพลาดของแบบจำลอง AR กับแบบจำลอง ARX ค่าที่ได้จากแบบจำลอง ARX จะต่ำกว่าแบบจำลอง AR

วิเคราะห์วิจารณ์ จากสมมุติฐานว่าแบบจำลอง ARX จะสามารถหารูปแบบของเกรนเจอร์ได้ดีกว่าเพราะว่าการประมาณในแบบจำลอง ARX ได้ใช้ข้อมูลของสัญญาณขาเข้ารวมเข้าไป ทำให้แบบจำลอง ARX เรียนรู้ถึงพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาเข้าด้วยพร้อมกับพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาออกในอดีต แต่แบบจำลอง AR เรียนรู้เพียงพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาออกเท่านั้น ทำให้การหารูปแบบของเกรนเจอร์ที่อยู่ในพารามิเตอร์ A_k ของแบบจำลอง ARX สามารถเรียนรู้ได้ดีกว่าเพราะแบบจำลอง ARX ส่วนพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาเข้าและพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาออกในอดีตเมื่อเทียบกับข้อมูลจริง แต่พารามิเตอร์ A_k ในแบบจำลอง AR จะต้องแสดงถึงพลวัตของสัญญาณขาออกในอดีตกับสัญญาณขาเข้าพร้อมกัน

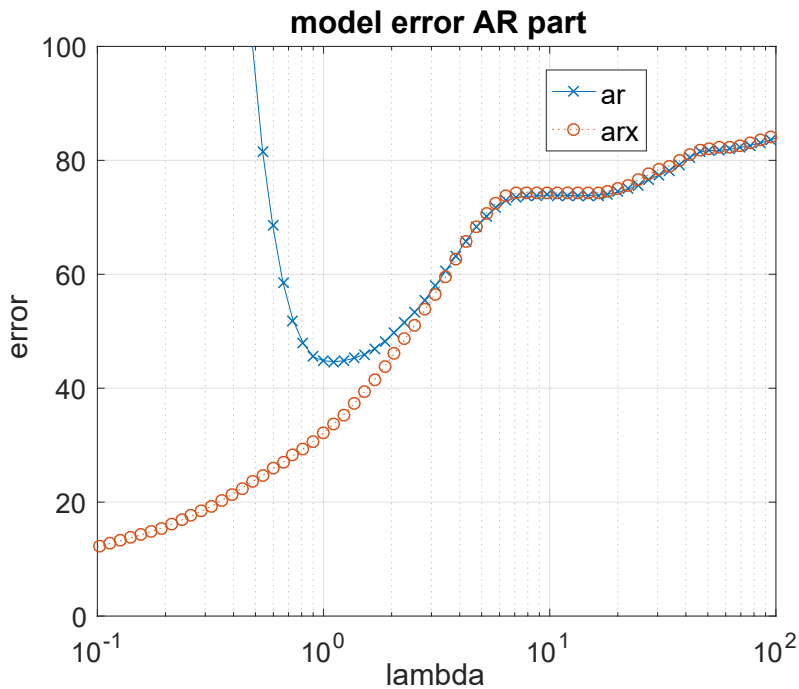
8.1.2 ผลการประมาณความผิดพลาดแบบจำลองในส่วนของ การถดถอยตัวเอง

การทดลองนี้ต้องการศึกษาความผิดพลาดของพารามิเตอร์ที่อยู่ในแบบจำลองว่ามีผลต่างกับค่าจริงมากน้อยต่างกันอย่างไร โดยการทดลองนี้จะเปรียบเทียบเพียงส่วนของการถดถอยตัวเอง (หรือส่วนของ A_k เท่านั้น) การทดลองนี้วิเคราะห์ผ่านสมการ

$$\text{error} = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\sum_{j=1}^p \|A_j - \hat{A}_j\|_F^2)}{\sum_{j=1}^p \|A\|_F^2}}$$

การประมาณแบบจำลองในการทดลองนี้จะสมมติว่าเราทราบถึงอันดับของแบบจำลอง การทดลองเราจะแสดงผลออกมาด้วยกราฟระหว่างค่า λ และค่าความผิดพลาดพารามิเตอร์ในแบบจำลอง

สมมุติฐาน การทดลองนี้มีสมมุติฐานว่าแบบจำลอง ARX จะมีค่าความผิดพลาดของพารามิเตอร์น้อยกว่าแบบจำลอง AR เพราะว่าแบบจำลอง ARX แยกพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาเข้ากับพลวัตของสัญญาณขาออกในอดีตอย่างชัดเจน



รูปที่ 8: ความผิดพลาดของแบบจำลอง AR และแบบจำลอง ARX เทียบกับค่า λ เมื่อเฉลี่ยบนข้อมูล 30 ชุด

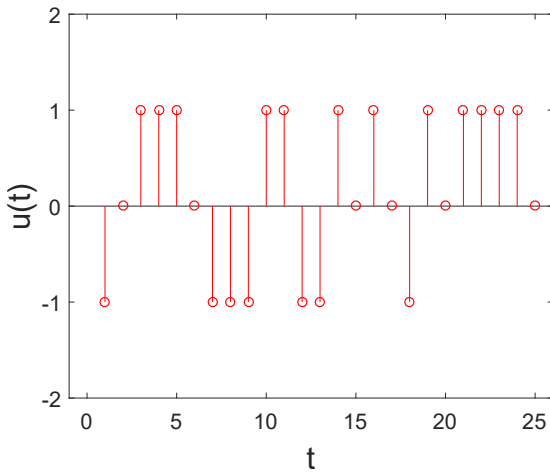
ผลลัพธ์ แบบจำลอง ARX สามารถประมาณแบบจำลองได้ดีกว่าแบบจำลอง AR ในเชิงของความผิดพลาดของพารามิเตอร์ในแบบจำลอง ดูได้จากกราฟความผิดพลาดของพารามิเตอร์ในแบบจำลอง จากกราฟในรูปที่ 8

วิเคราะห์วิจารณ์ แบบจำลอง ARX แยกส่วนของพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาเข้ากับพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาออกในอดีต แต่แบบจำลอง AR มีแต่พลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาออกในอดีตเท่านั้น ซึ่งโดยระบบจริงมีพลวัตที่เกิดจากสัญญาณขาเข้าและสัญญาณขาออกในอดีตทำให้การประมาณแบบจำลอง AR จะต้องเรียนรู้พลวัตของสัญญาณขาเข้ากับสัญญาณขาออกในอดีตของระบบจริงพร้อมกัน แบบจำลอง ARX จึงประมาณได้ดีกว่าเพราะโครงสร้างมีความคล้ายกับระบบจริงมากกว่าแบบจำลอง AR

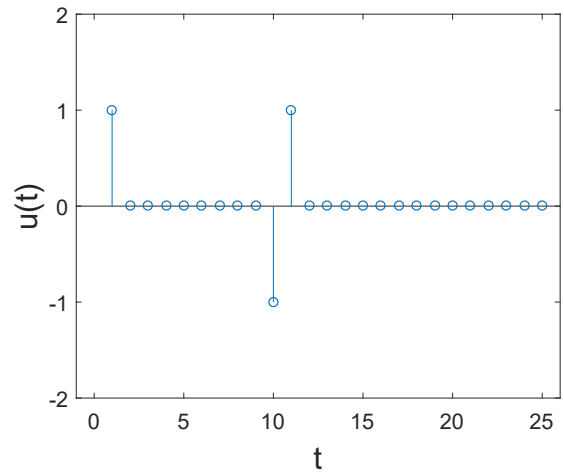
8.2 การเปรียบเทียบผลการประมาณแบบจำลอง ARX กับข้อมูลที่เกิดจากระดับการกระตุ้นที่ต่างกัน

การทดลองสนใจเพียงการประมาณแบบจำลอง ARX เมื่อระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าเปลี่ยนไป การทดลองนี้จะประกอบด้วย 4 ขั้นตอน ขั้นตอนแรกคือสร้างแบบจำลองสังเคราะห์ขึ้นมาเป็นแบบจำลอง ARX ที่เป็นตัวแทนของระบบจริงที่มีโครงสร้างเป็น $q = 10, p = 2, m = 1$ และ $r = 1$ แบบจำลองที่สร้างขึ้นมีลักษณะพิเศษคือค่าที่อยู่ใน A_k มี 40 % มีไม่เป็นศูนย์ ขั้นตอนที่ 2 คือสร้างอนุกรมเวลามาจากสัญญาณขาเข้า $u(t)$ และสัญญาณรบกวน $e \sim \mathcal{N}(0, 0.01)$ 500 จุดเวลา ทั้งหมด 30 ชุด สัญญาณขาเข้าที่ใช้ในการทดลองนี้แบ่งเป็น 2 ประเภท สัญญาณขาเข้าประเภทแรกเป็นสัญญาณขาเข้าที่มีการกระตุ้นระ

ดับสูง เป็นสัญญาณขาเข้าที่เกิดจากการสุ่มที่ออกมา 3 ค่า คือ $-1, 0, 1$ และมีค่าที่ไม่เป็น 0 เกือบทุกช่วงเวลา สัญญาณขาเข้าประเภทที่สองเป็นสัญญาณขาเข้าที่มีการกระตุ้นระดับต่ำ ค่าสัญญาณขาเข้าสู่่มค่าออกมาเพียง 3 ค่าคือ $-1, 0, 1$ แต่จำนวนของค่าที่ไม่เป็น 0 ที่เกิดขึ้นมีเพียง 2 % ของจุดเวลาทั้งหมด (ตัวอย่างลักษณะของสัญญาณขาเข้าที่ใช้ในการทดลองในรูป 9a และ 9b) ขั้นตอนสุดท้ายคือประมาณแบบจำลองและวิเคราะห์ผลที่ได้



(a) ตัวอย่างของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับกระตุ้นสูง



(b) ตัวอย่างของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับกระตุ้นต่ำ

รูปที่ 9: ตัวอย่างของสัญญาณขาเข้าที่ใช้ในการทดลองเปรียบเทียบผลของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่แตกต่างกัน

8.2.1 ความผิดพลาดการประมาณพารามิเตอร์ในแบบจำลอง

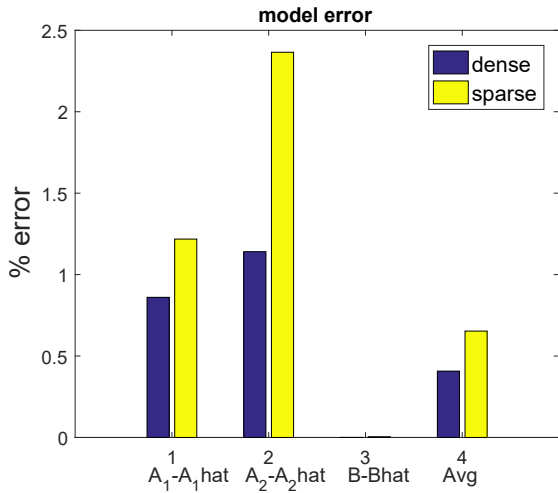
การทดลองนี้จะวิเคราะห์ถึงพารามิเตอร์ที่มาจากประมาณแบบจำลองจะแสดงออกมาในรูปของกราฟผลรวมของพารามิเตอร์แต่ละตัว และสมมติว่าเราทราบถึงอันดับของแบบจำลองและทราบถึงเงื่อนไขเกรนเจอร์ หรือการทดลองนี้จะเลือกใช้รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลองที่มีเงื่อนไขเกรนเจอร์ (9) การเปรียบเทียบจะใช้ตัวชี้วัด

$$\text{error avg} = \frac{1}{N} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (\sum_{j=1}^p \|A_j - \hat{A}_j\|_F^2 + \sum_{j=1}^r \|B_j - \hat{B}_j\|_F^2)}{\sum_{j=1}^p \|A_j\|_F^2 + \sum_{j=1}^r \|B_j\|_F^2}}$$

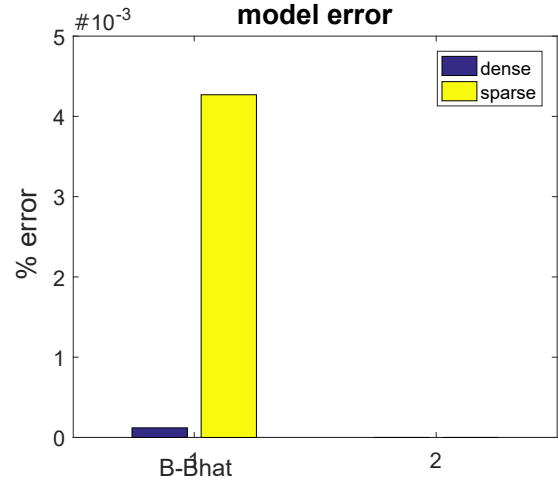
สมมุติฐาน การทดลองนี้มีสมมุติฐานว่าผลการประมาณแบบจำลอง ARX จากข้อมูลที่ระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสู่มีความผิดพลาดของพารามิเตอร์ในแบบจำลองต่ำกว่าผลการประมาณแบบจำลองจากข้อมูลที่ระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ เพราะว่าเรามีข้อมูลของสัญญาณขาเข้ามากกว่า

ผลลัพธ์ แบบจำลองที่ประมาณมาจากสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงกว่าสามารถประมาณค่าพารามิเตอร์ได้แม่นยำกว่าเมื่อเทียบกับแบบจำลองที่ประมาณได้จากสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่ต่ำ ดูจากกราฟความผิดพลาดของพารามิเตอร์ในแบบจำลอง จากรูปที่ 10a และ 10b

วิเคราะห์วิจารณ์ พารามิเตอร์ที่ประมาณมาจากรูปแบบปัญหา (9) เมทริกซ์ความแปรปรวนของพารามิเตอร์คือ $\sigma^2(C^T C)^{-1}$ เมื่อ $C = \begin{bmatrix} \tilde{G} & F \end{bmatrix}$ จากเมทริกซ์ F ในรูปแบบปัญหา (9) ประกอบไปด้วย $u(t)$ ถ้าระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ หมายความว่า เมทริกซ์ F มีค่า 0 ในเมทริกซ์จำนวนมากทำให้ค่าที่อยู่ในเมทริกซ์ $C^T C$ มีค่าที่ต่ำ ดังนั้นค่าที่อยู่ในเมทริกซ์ $\sigma^2(C^T C)^{-1}$ มีค่าที่สูง ดังนั้นเมื่อสัญญาณขาเข้ามีระดับการกระตุ้นต่ำ ค่าความผิดพลาดจากแบบจำลองที่ประมาณมาจากข้อมูลนั้นมีค่าสูงกว่าเพราะ เมทริกซ์ $\sigma^2(C^T C)^{-1}$ มีค่ามากกว่า



(a) ผลความผิดพลาดของแต่ละพารามิเตอร์ในแบบจำลอง



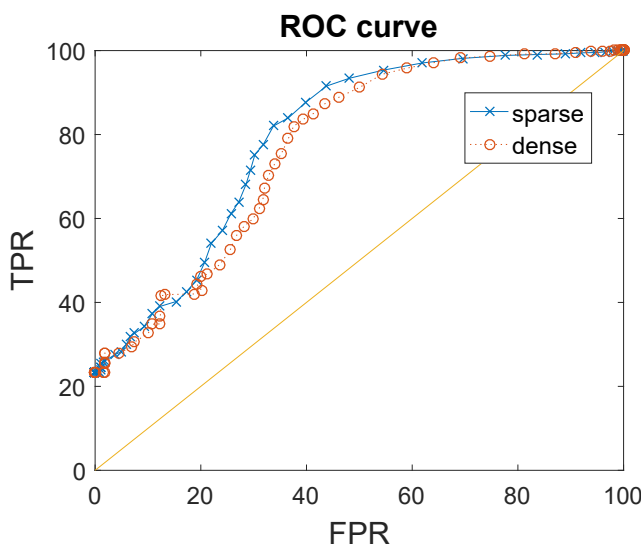
(b) ผลความผิดพลาดของแต่ละพารามิเตอร์ B ในแบบจำลอง

รูปที่ 10: กราฟแสดงถึงความผิดพลาดในการประมาณแบบจำลอง ARX เมื่อข้อมูลที่ใช้ในการประมาณมีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่างกัน หมายเลข 1 เป็นค่าความผิดพลาดของ \hat{A}_1 หมายเลข 2 คือค่าผิดพลาดของ \hat{A}_2 หมายเลข 3 คือค่าผิดพลาดของ B และหมายเลข 4 คือค่าผิดพลาดเฉลี่ยของพารามิเตอร์ทั้ง 3 ตัว dense แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูงและ sparse แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ

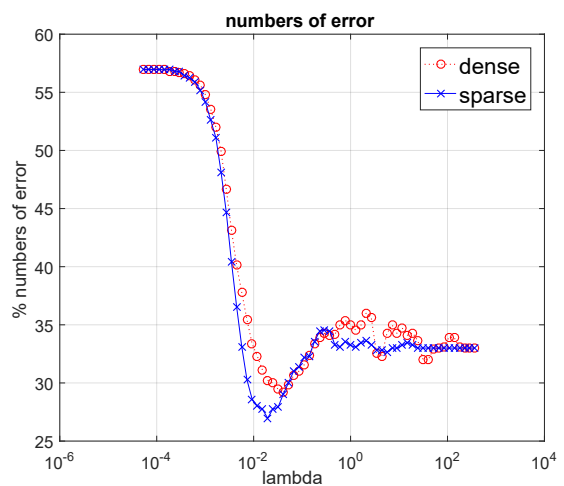
8.2.2 ความถูกต้องของรูปแบบเกรนเจอร์บนแบบจำลอง

การทดลองนี้ต้องการศึกษาการหารูปแบบเกรนเจอร์ที่ได้จากการประมาณแบบจำลองว่าตรงกับระบบจริงที่สร้างขึ้นขนาดไหน หรือหมายความว่ารูปแบบของค่าศูนย์ที่อยู่ใน A_k ที่ได้มาจากการประมาณแบบจำลอง ARX จากข้อมูลที่เกิดจากระบบที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงและต่ำ มีรูปแบบของค่าศูนย์ตรงกับรูปแบบของค่าศูนย์ในระบบจริงมากขนาดไหน โดยค่า λ ที่เลือกจะอยู่ในช่วงของ $(0, \lambda_c)$ มาทั้งหมด 100 ค่าแล้วใช้รูปแบบปัญหา (12) ผลการทดลองนี้จะแสดงออกมาในลักษณะกราฟของ ROC และกราฟจำนวนตำแหน่งที่หารูปแบบเกรนเจอร์ที่ผิดพลาด

สมมุติฐาน การทดลองนี้มีสมมุติฐานว่ามีสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงกว่าจะสามารถหาตำแหน่งของเงื่อนไขของเกรนเจอร์ได้ดีกว่า เพราะว่า สัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงกว่าสามารถประมาณแบบจำลองได้ดีกว่า



(a) กราฟ ROC ของการหารูปแบบเกรนเจอร์ของแบบจำลอง ARX



(b) จำนวนตำแหน่งของรูปแบบเกรนเจอร์ที่ผิดพลาดของแบบจำลอง ARX กับค่า λ

รูปที่ 11: ผลการประมาณรูปแบบเกรนเจอร์ของแบบจำลอง ARX จากข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่างกัน โดยใช้รูปแบบปัญหา (12) ที่ค่า λ หลายค่า dense แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูง sparse แทนข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ

ผลลัพธ์ รูปแบบของเกรนเจอร์ของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงกว่าสามารถหารูปแบบของเกรนเจอร์ได้แยกแยะสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่ต่ำกว่าได้จากรูปที่ 11a ค่าที่อยู่บนซ้ายสุดในกราฟ ROC ของข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำอยู่สูงกว่าข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูง แต่จุดต่ำสุดของกราฟจำนวนความผิดพลาดเฉลี่ยของเกรนเจอร์มีค่าเท่ากัน

วิเคราะห์วิจารณ์ รูปแบบของเกรนเจอร์ที่ ประมาณมาจาก ข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำสามารถประมาณรูปแบบเกรนเจอร์ได้ดีกว่าเพราะว่ารูปแบบเกรนเจอร์คือโครงสร้างของพารามิเตอร์ A_k สำหรับข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่ำ พลวัตที่เกิดจากข้อมูลนี้เกิดจากสัญญาณขาออกส่วนใหญ่ ตามสมการ (20)

$$y(t) = A_1 y(t-1) + \dots + A_p y(t-p) + B_1 u(t-1) + \dots + B_q u(t-q) + e(t) \quad (20)$$

เนื่องจาก A_k ในระบบจริงมีความเบาบาง (พารามิเตอร์ที่ไม่เป็นศูนย์ 40 %) โอกาสที่ y ตำแหน่งที่ j (y_j) มีการเปลี่ยนแปลงที่น้อยมีโอกาสมาก การที่มีสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นสูงทำให้ค่า y_j เกิดการเปลี่ยนแปลง การเรียนรู้ ตำแหน่งของศูนย์ในแบบจำลองยากขึ้น การทดลองนี้ไม่เหมือนกับการทดลอง 8.1.1 เพราะว่าการประมาณในการทดลองนี้แยกเป็นพารามิเตอร์คือ A, B เหมือนกันแต่การทดลองที่ 8.1.1 แบบจำลอง AR มีเพียง A แต่แบบจำลอง ARX มี A, B

8.2.3 ความถูกต้องของการเลือกอันดับแบบจำลอง

การทดลองนี้วิเคราะห์อันดับของแบบจำลองที่เหมาะสมโดยเลือกจากค่า BIC ระหว่างข้อมูลที่มีสัญญาณการกระตุ้นในระบบมีค่าสูงและข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าในระดับต่ำโดยเรสมมุติว่ารู้เงื่อนไขเกรนเจอร์ของแบบจำลอง

BIC score หนึ่งในเกณฑ์การเลือกอันดับของแบบจำลองที่เหมาะสมเพื่อหาความสัมพันธ์ของพารามิเตอร์ในแบบจำลอง คือ เกณฑ์การคัดเลือกตัวแบบโดยข้อสนเทศของเบส์ (Bayesian Information Criterion (BIC)) [17] ค่า BIC คำนวณตามสมการ (21)

$$\text{BIC} = -2\mathcal{L} + d \log N \quad (21)$$

โดย N เป็นจำนวนข้อมูล, \mathcal{L} เป็นค่าลอการิทึมของฟังก์ชันความเป็นไปได้ (log likelihood function) และค่า d คือ จำนวนตัวแปรที่มีผลต่อการประมาณ ค่า \mathcal{L} เป็นค่าที่ขึ้นกับ $\hat{\Sigma}$ (ตัวประมาณเมทริกซ์ความแปรปรวนของสัญญาณขาออก) ที่คำนวณได้จาก

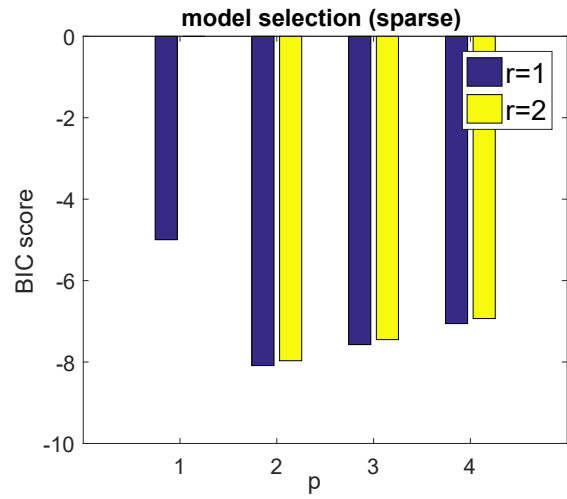
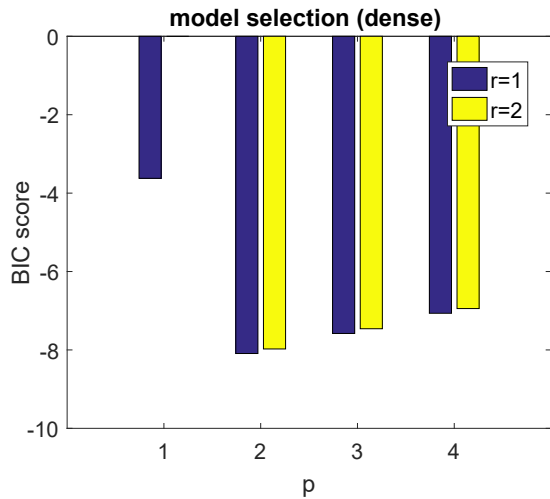
$$\begin{aligned} \hat{\Sigma} &= \frac{1}{N-p} \sum_{t=p+1}^N \hat{e}(t) \hat{e}(t)^T \\ \hat{e}(t) &= y(t) - \sum_{i=1}^p \hat{A}_i y(t-i) - \sum_{i=1}^r \hat{B}_i u(t-i) \end{aligned} \quad (22)$$

ค่า BIC จะเปรียบเทียบความสมดุลระหว่าง ความคล้ายกันของสัญญาณขาออกที่ประมาณมาได้กับความซับซ้อนของแบบจำลอง ตัวแทนของความคล้ายกันของสัญญาณขาออกคือค่าลอการิทึมของฟังก์ชันความเป็นไปได้ \mathcal{L} และตัวแทนของความซับซ้อนของแบบจำลองคือจำนวนพารามิเตอร์ d ตามสมการ (21) ถ้าปรับอันดับของแบบจำลองที่สูงขึ้น (ค่า p เพิ่มขึ้น, ค่า r เพิ่มขึ้น) เราสามารถประมาณแบบจำลองให้เทียบเท่ากับสัญญาณขาออกได้ดีขึ้นเพราะมีจำนวนพารามิเตอร์ให้ปรับได้มากขึ้น (ค่า \mathcal{L} สูงขึ้น) แต่ทำให้ความซับซ้อนของแบบจำลองมากขึ้น (ค่า d สูงขึ้น) ค่า BIC เลือกตำแหน่งที่สมดุลระหว่าง 2 ค่า โดยค่าที่ BIC ต่ำสุดเป็นการเลือกจุดที่สมดุลที่สุดระหว่าง 2 ค่านั้น จากสมการ (21) จะสามารถเปลี่ยนรูปให้การคำนวณค่า BIC ให้อยู่รูปแบบที่ง่ายขึ้นโดยใช้สมการ (22) (รายละเอียดที่มาของสมการ (23) สามารถดูได้ในหัวข้อ 11.5)

$$\text{BIC} = \log \det \hat{\Sigma} + \frac{d}{N-p} \log N \quad (23)$$

สมมุติฐาน การทดลองนี้มีสมมุติฐานว่าแบบจำลองที่ประมาณจากข้อมูลที่มีสัญญาณขาเข้าที่มีระดับการกระตุ้นที่สูงสามารถเลือกอันดับของแบบจำลองได้แม่นยำกว่าแบบจำลองที่ประมาณจากข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่ต่ำ

ผลลัพธ์ ข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่มีระดับสูงและต่ำสามารถเลือกอันดับของแบบจำลองได้ถูกต้องทั้งคู่ แต่ผลต่างระหว่างค่า BIC ต่ำที่สุด 2 ค่าของข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าที่สูงมีค่ามากกว่าข้อมูลที่มีสัญญาณขาเข้าในระดับการกระตุ้นที่ต่ำ



(a) ค่า BIC ของข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าสูง

(b) ค่า BIC ของข้อมูลที่มีระดับการกระตุ้นของสัญญาณขาเข้าต่ำ

รูปที่ 12: BIC ของแบบจำลองอันดับต่างกัน

วิเคราะห์วิจารณ์ โดยปกติข้อมูลที่มีสัญญาณขาเข้าในระดับการกระตุ้นที่ต่ำควรที่จะเลือกอันดับในแบบจำลองผิดพลาดแต่ว่าเนื่องจากค่าของสัญญาณรบกวนมีค่าความแปรปรวนที่ต่ำ ($\sigma^2 = 0.01$) และจำนวนข้อมูลมีค่ามากพอ (500 จุดเวลา) ทำให้แบบจำลองยังประมาณได้ถูกต้องอยู่

9 สรุปภาพรวมของโครงการ

การวิเคราะห์ถึงความสัมพันธ์ของส่วนต่างๆในสมองด้วยวิธีการสร้างแบบจำลองกับข้อมูล fMRI แบบจำลองที่นิยมใช้คือแบบจำลอง AR แต่การใช้แบบจำลอง AR มีข้อเสียคือไม่สามารถอธิบายถึงการกระตุ้นจากภายนอกได้ ดังนั้นการใช้แบบจำลอง AR ไม่สามารถอธิบายถึงข้อมูล fMRI ที่ผู้ทดลองได้รับการกระตุ้นจากสิ่งเร้าภายนอกได้ โครงการนี้จัดทำขึ้นมีจุดประสงค์เพื่อหาความสัมพันธ์ของส่วนต่างๆในสมองกับการกระตุ้นด้วยสิ่งเร้าที่วิเคราะห์ผ่านข้อมูล fMRI โดยใช้แบบจำลอง ARX วิเคราะห์ความสัมพันธ์เหล่านี้ โดยมีหลักพื้นฐานของความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ในแบบจำลอง โดยโครงการนี้ได้อธิบายถึงความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ที่มีผลต่อการประมาณแบบจำลอง ARX ออกเป็นรูปแบบปัญหาการประมาณ 3 รูปแบบ (รูปแบบปัญหาอยู่หัวข้อ 5) ในการแก้รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX โครงการนี้ได้นำเสนอขั้นตอนเชิงเลข ADMM ที่มีประสิทธิภาพ (ในเชิงของความเร็วในการคำนวณและจำนวนของพื้นที่ในการเก็บ) พร้อมชุดคำสั่งในโปรแกรม MATLAB ที่สมบูรณ์ โครงการนี้ได้ทดสอบสมมติฐานในการใช้แบบจำลอง ARX เปรียบเทียบกับแบบจำลอง AR ในการอธิบายข้อมูลจากระบบที่มีสัญญาณขาเข้า ผลลัพธ์ที่ได้คือแบบจำลอง ARX สามารถประมาณแบบจำลองได้ดีกว่าแบบจำลอง AR ในแง่ของการหารูปแบบเกรนเจอร์ในแบบจำลองและความผิดพลาดของพารามิเตอร์ที่ประมาณได้ในส่วนของการถดถอยตัวเอง (ส่วนของ AR) สิ่งที่โครงการนี้ทำไม่สำเร็จคือการใช้รูปแบบปัญหาทดสอบกับข้อมูล fMRI เนื่องจากได้ใช้เวลาในส่วนของ การออกแบบโปรแกรมสำหรับข้อมูล fMRI ขนาดใหญ่ แต่ว่าตอนนี้ได้วิธีการแก้ปัญหาพร้อมชุดคำสั่งในการแก้ปัญหาการประมาณแบบจำลองที่ใช้กับข้อมูล fMRI จริงได้ในภาคหน้า

10 กิตติกรรมประกาศ

โครงการวิศวกรรมไฟฟ้า เรื่องการวิเคราะห์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์สำหรับข้อมูลสมองจากการตอบสนองต่อสิ่งเร้า จะไม่สามารถสำเร็จ ได้เลย หากขาดความช่วยเหลือและการสนับสนุนจาก 1. ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. จิตโกมุท สงศิริ อาจารย์ ที่ปรึกษาในวิชาโครงการวิศวกรรมไฟฟ้า โดยการให้คำปรึกษา และคำแนะนำที่เป็นประโยชน์ในการทำโครงการนี้ 2. ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.สุชิน อรุณสวัสดิ์วงศ์ หัวหน้าอาจารย์ประจำห้องปฏิบัติการควบคุมภาควิชาวิศวกรรมไฟฟ้า โดยการให้ใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการดำเนินงานคำสั่งโปรแกรม MATLAB 3. อนุพันธ์ พงศ์อิศรวณิช มหามบัณฑิต ที่ช่วยหาข้อมูล fMRI ที่ใช้และสอนวิธีการประมวลผลข้อมูล fMRI ให้อยู่ในรูปแบบของอนุกรมเวลา 4. นายณัฐพร พลับอินทร์ นิสิตปริญญาโท ที่ช่วยหาข้อมูล fMRI

เอกสารอ้างอิง

- [1] “ตรวจสอบสุขภาพลึกเข้าไป’MRI’เห็นข้างในรู้ทันโรค.” <http://www.clipmass.com/story/35886>. Accessed: 2011-08-22.
- [2] M. A. Lindquist *et al.*, “The Statistical analysis of fMRI data,” *Statistical Science*, vol. 23, no. 4, pp. 439–464, 2008.
- [3] O. J. Arthurs and S. Boniface, “How well do we understand the neural origins of the fMRI BOLD signal?,” *Trends in neurosciences*, vol. 25, no. 1, pp. 27–31, 2002.
- [4] F.-H. Lin, T. Witzel, T. Raji, J. Ahveninen, K. W.-K. Tsai, Y.-H. Chu, W.-T. Chang, A. Nummenmaa, J. R. Polimeni, W.-J. Kuo, *et al.*, “fMRI hemodynamics accurately reflects neuronal timing in the human brain measured by MEG,” *Neuroimage*, vol. 78, pp. 372–384, 2013.
- [5] A. Pongrattanakul, P. Lertkultanon, and J. Songsiri, “Sparse system identification for discovering brain connectivity from fMRI time series,” in *SICE Annual Conference (SICE), 2013 Proceedings of*, pp. 949–954, IEEE, 2013.
- [6] K. J. Friston, A. Mechelli, R. Turner, and C. J. Price, “Nonlinear responses in fMRI: the Balloon model, Volterra kernels, and other hemodynamics,” *Neuroimage*, vol. 12, no. 4, pp. 466–477, 2000.
- [7] M. A. Lindquist, J. M. Loh, L. Y. Atlas, and T. D. Wager, “Modeling the hemodynamic response function in fmri: efficiency, bias and mis-modeling,” *Neuroimage*, vol. 45, no. 1, pp. S187–S198, 2009.
- [8] A. Pruttiakaravanich and J. Songsiri, “A Review on dependence measures in exploring brain networks from fMRI data,” *Engineering Journal*, vol. 20, no. 3, pp. 207–233, 2016.
- [9] A. Fornito, A. Zalesky, and M. Breakspear, “Graph analysis of the human connectome: promise, progress, and pitfalls,” *Neuroimage*, vol. 80, pp. 426–444, 2013.
- [10] A. Razi and K. Friston, “The Connected brain: Causality, models, and intrinsic dynamics,” *IEEE Signal Processing Magazine*, vol. 33, no. 3, pp. 14–35, 2016.
- [11] X. Zhang, B. Hu, X. Ma, and L. Xu, “Resting-state whole-brain functional connectivity networks for mci classification using l2-regularized logistic regression,” *IEEE transactions on nanobioscience*, vol. 14, no. 2, pp. 237–247, 2015.
- [12] K. Friston, R. Moran, and A. K. Seth, “Analysing connectivity with granger causality and dynamic causal modelling,” *Current opinion in neurobiology*, vol. 23, no. 2, pp. 172–178, 2013.
- [13] J. Songsiri, “Sparse autoregressive model estimation for learning granger causality in time series,” in *2013 IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing*, pp. 3198–3202, IEEE, 2013.
- [14] T. Hastie, R. Tibshirani, and M. Wainwright, *Statistical learning with sparsity*. CRC press, 2015.
- [15] L. V. Stephen Boyd, *Convex Optimization*, vol. 30. cambridge, 2009.
- [16] E. K. Chong and S. H. Zak, *An introduction to optimization*, vol. 76. John Wiley & Sons, 2013.
- [17] L. Ljung, *System identification*. Wiley Online Library, 1999.
- [18] C. W. Granger, “Investigating causal relations by econometric models and cross-spectral methods,” *Econometrica: Journal of the Econometric Society*, pp. 424–438, 1969.
- [19] S. Boyd, N. Parikh, E. Chu, and B. Peleato, “Distributed optimization via alternating direction method of multipliers,” *Foundations and Trends in Machine Learning*, vol. 3, pp. 1–122, 2010.

11 ภาคผนวก

11.1 ความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ที่ใช้ในสภาพเชื่อมโยงของสมอง

การศึกษาคำสัมพันธ์ของบริเวณต่างๆ ในสมองที่ใช้สมการพลวัตที่อธิบายความเกี่ยวข้องกันของสัญญาณสมอง นิยมใช้แบบจำลองถดถอยตัวเอง (3) วิเคราะห์สภาพการเชื่อมโยงของสมองเชิงประสิทธิภาพ การใช้ความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ในแบบจำลองถดถอยตัวเอง เป็นเทคนิคที่สามารถหาค่าของ $(A_k)_{ij} = 0$ โดย $k = 1, 2, \dots, p$ หรือการหาค่าของ y_j ไม่มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุ y_i ใดบ้าง การตรวจสอบด้วยความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ที่นิยมใช้มี 2 วิธีคือ Pairwise Granger Causality และ Conditional Granger Causality

11.1.1 Pairwise Granger Causality (GC)

เทคนิค Pairwise Granger Causality หรือ Pairwise GC เป็นเทคนิคที่นิยมใช้ในการตรวจสอบความสัมพันธ์ระหว่างสัญญาณ 2 กลุ่ม ข้อดีคือสามารถหาค่าตามผลเฉลยได้ง่าย และให้คำตอบที่ชัดเจน สำหรับคู่สัญญาณสเกลาร์ $x(t) \in \mathbb{R}$ และ $y(t) \in \mathbb{R}$ ในการประมาณสัญญาณโดยอธิบายได้ตามสมการด้านล่าง

$$x(t) = \sum_{k=1}^p a_k x(t-k) + \epsilon_1(t) \quad \text{var}(\epsilon_1(t)) = \Sigma_1 \quad (24)$$

$$y(t) = \sum_{k=1}^p c_k y(t-k) + \nu_1(t) \quad \text{var}(\nu_1(t)) = \Gamma_1 \quad (25)$$

และถ้าสองกลุ่มนี้มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุต่อกันจะสามารถเขียนได้ว่า

$$x(t) = \sum_{k=1}^p a'_k x(t-k) + \sum_{k=1}^p b'_k y(t-k) + \epsilon_2(t) \quad (26)$$

$$y(t) = \sum_{k=1}^p c'_k y(t-k) + \sum_{k=1}^p d'_k x(t-k) + \nu_2(t) \quad (27)$$

ในสมการ (26) เป็นการใส่ค่า y มาช่วยในการทำนายค่า x , ในสมการ (27) เป็นการใส่ค่าของ x มาช่วยในการทำนายค่า y เมทริกซ์ความแปรปรวนรวมของ $\begin{bmatrix} \epsilon_2(t) \\ \nu_2(t) \end{bmatrix}$ คือ $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_2 & \Upsilon_2 \\ \Upsilon_2 & \Gamma_2 \end{bmatrix}$ เมื่อให้ $\Sigma_2 = \text{var}(\epsilon_2(t))$, $\Gamma_2 = \text{var}(\nu_2(t))$, $\Upsilon_2 = \text{cov}(\epsilon_2(t), \nu_2(t))$ ถ้า $x(t)$ และ $y(t)$ เป็นอิสระต่อกันแล้ว ในสมการ (26), (27) $\Upsilon_2 = 0$ ใน [18] กล่าวเอาไว้ว่าจะหาปริมาณที่ $y(t)$ มีผลกระทบเชิงสาเหตุต่อ $x(t)$ ได้จาก

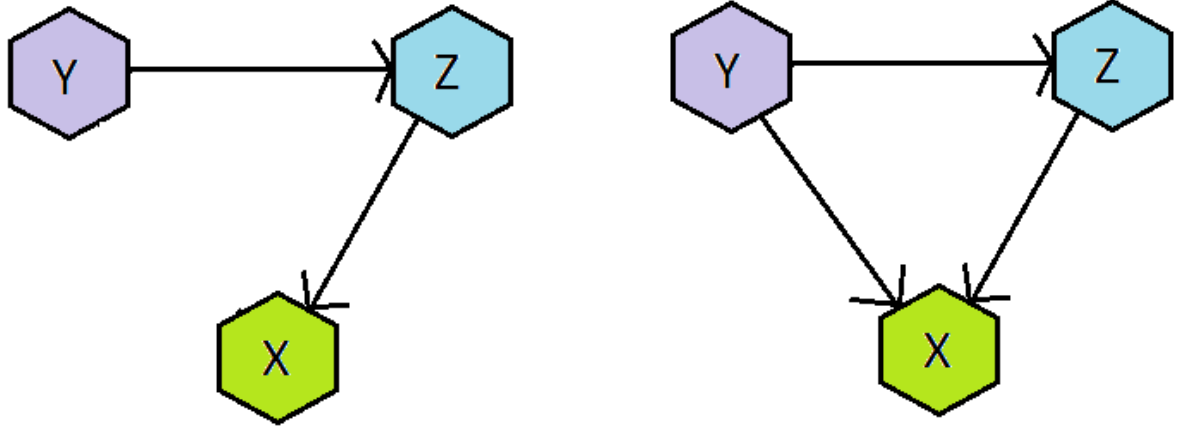
$$F_{y \rightarrow x} = \log \left(\frac{\Sigma_1}{\Sigma_2} \right) \quad (28)$$

จะเห็นว่าค่าของ $F_{y \rightarrow x}$ นั้นจะมีค่าที่มากกว่าหรือเท่ากับ 0 เสมอเพราะการมีค่า y มาช่วยในการทำนายค่า x ควรจะช่วยให้การทำนายดีขึ้นหรือ $\Sigma_1 \geq \Sigma_2$ แต่ถ้า $F_{y \rightarrow x} = 0$ หรือ $\Sigma_2 = \Sigma_1$ นั้นหมายความว่าของ $y(t)$ ไม่สามารถช่วยในการทำนายค่าของ $x(t)$ ได้เลยหรือ $b'_k = 0$ โดย $k = 1, 2, \dots, p$ แต่ถ้า $F_{y \rightarrow x} > 0$ หรือ $\Sigma_2 < \Sigma_1$ เมื่อ $y(t)$ มีผลกระทบเชิงสาเหตุ $x(t)$ หรือ $b'_k \neq 0$ โดย $k = 1, 2, \dots, p$

แต่ว่าการใช้วิธีนี้มีข้อเสียสำหรับการพิจารณา ความสัมพันธ์เชิงเหตุผล ระหว่างตัวแปรกลุ่มที่มีจำนวนมากกว่า 2 ตัวแปร รูปที่ 13 เป็นการแสดงความสัมพันธ์เชิงเหตุผลของสัญญาณ $y(t) \in \mathbb{R}$ และ $z(t) \in \mathbb{R}$ ที่มีผลต่อ $x(t) \in \mathbb{R}$ ในการคิดแบบ Pairwise GC เมื่อหาค่าความสัมพันธ์เชิงสาเหตุที่ $y(t)$ ส่งผลต่อ $x(t)$ แม้ว่า $y(t)$ จะไม่มีผลโดยตรงต่อ $x(t)$ แต่มีผลทางอ้อมผ่าน $z(t)$ แบบรูปที่ 13a ก็จะทำให้ค่าคงที่บอกค่า $y(t)$ ก็จะบ่งบอกว่า $y(t)$ มีผลทางตรงต่อ $x(t)$ แบบรูปที่ 13b ดังนั้นเมื่อข้อมูลมีมากกว่า 3 กลุ่มขึ้นไป Conditional Granger Causality จึงเป็นเทคนิคที่ใช้ในการหาความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ โดยสามารถแยกความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบรูปที่ 13a และ 13b

11.1.2 Conditional Granger Causality

Conditional Granger Causality เป็นการตรวจสอบความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์สำหรับตัวแปรที่มีมากกว่า 2 ตัวแปรขึ้นไป ตัวอย่างเช่น กลุ่มข้อมูล $x(t)$, $y(t)$ และ $z(t)$ เมื่อต้องการพิสูจน์ว่า $y(t)$ มีผลต่อ $x(t)$ หรือไม่ โดยที่ $x(t)$ และ $z(t)$



(a) ภาพแสดงความสัมพันธ์เชิงสาเหตุแบบเกรนเจอร์โดยที่ y นั้นส่งผลต่อ z และ z ส่งผลต่อ x แต่ y ไม่ส่งผลต่อ x โดยตรง

(b) ภาพแสดงความสัมพันธ์เชิงสาเหตุแบบเกรนเจอร์โดยที่ y นั้นส่งผลต่อ z และ z ส่งผลต่อ x แต่ y ไม่ส่งผลต่อ x โดยตรง

รูปที่ 13: ตัวอย่างความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์ของ x, y และ z

มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุซึ่งกันและกัน สามารถสร้างสมการได้ว่า

$$\begin{aligned} x(t) &= \sum_{k=1}^p a_k x(t-k) + \sum_{k=1}^p b_k z(t-k) + \epsilon_1(t) \\ z(t) &= \sum_{k=1}^p c_k z(t-k) + \sum_{k=1}^p d_k x(t-k) + \nu_1(t) \end{aligned} \quad (29)$$

โดยมีเมทริกซ์ความแปรปรวนดังนี้

$$\Sigma' = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & \Upsilon_1 \\ \Upsilon_1 & \Gamma_1 \end{bmatrix}$$

ถ้า $y(t)$ มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุกับ $x(t)$ และ $z(t)$ จะได้ว่า

$$\begin{aligned} x(t) &= \sum_{k=1}^p a'_k x(t-k) + \sum_{k=1}^p b'_k y(t-k) + \sum_{k=1}^p c'_k z(t-k) + \epsilon_2(t) \\ y(t) &= \sum_{k=1}^p d'_k x(t-k) + \sum_{k=1}^p e'_k y(t-k) + \sum_{k=1}^p g'_k yz(t-k) + \nu_2(t) \\ z(t) &= \sum_{k=1}^p u'_k x(t-k) + \sum_{k=1}^p v'_k y(t-k) + \sum_{k=1}^p w'_k z(t-k) + \lambda_2(t) \end{aligned} \quad (30)$$

จะหาเมทริกซ์ความแปรปรวนได้ว่า $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_{xx} & \Sigma_{xy} & \Sigma_{xz} \\ \Sigma_{yx} & \Sigma_{yy} & \Sigma_{yz} \\ \Sigma_{zx} & \Sigma_{zy} & \Sigma_{zz} \end{bmatrix}$ จากสมการด้านบนเราจะหาว่า $y(t)$ มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุต่อ $x(t)$ โดยพิจารณาว่า

$$F_{y \rightarrow x|z} = \log \left(\frac{\Sigma_1}{\Sigma_{xx}} \right)$$

Σ_1 คือความแปรปรวนที่มาจาก ความผิดพลาดตกค้าง (residual error) ของแบบจำลองที่ไม่รวมผลของ $y(t)$ และหลังจากเพิ่ม $y(t)$ เข้าไปใน (29) แล้วได้ว่า $F_{y \rightarrow x|z} = 0$ หรือ $\Sigma_1 = \Sigma_{xx}$ หมายความว่า การรวม $y(t)$ เข้าไปใน (29) ไม่มีส่วนช่วยในการหาค่า $x(t)$ ได้แม่นยำขึ้น หรือ $y(t)$ ไม่มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุกับ $x(t)$ แสดงว่า $b'_k = 0$ ทุก $k = 1, 2, \dots, p$ แต่หาก $F_{y \rightarrow x|z} > 0$ หรือ $\Sigma_1 > \Sigma_{xx}$ หมายความว่า การรวม $y(t)$ ใน (29) มีส่วนช่วยในการหาค่า $x(t)$ ได้แม่นยำขึ้น หรือ $y(t)$ มีความสัมพันธ์เชิงสาเหตุกับ $x(t)$ แสดงได้ว่า $b'_k \neq 0$ ทุก $k = 1, 2, \dots, p$ เมื่อนำไปใช้ในแบบจำลองถดถอยตัวเอง ถ้า y_j ไม่มีความสัมพันธ์เชิงเหตุผลแบบเกรนเจอร์กับ y_i ก็ต่อเมื่อ $(A_k)_{ij} = 0$ ทุก $k = 1, 2, \dots, p$

11.2 การแปลงปัญหาการหาค่าเหมาะสมที่สุดในรูปแบบเมทริกซ์เป็นรูปแบบเวกเตอร์

ในส่วนนี้จะอธิบายการแก้ปัญหามหาสมการ (9) ด้วยการเรียงให้เป็นเวกเตอร์

$$\begin{aligned} & \underset{A,B}{\text{minimize}} && (1/2)\|Y - AH - BK\|_F^2 \\ & \text{subject to} && (A_1)_{ij} = (A_2)_{ij} = \dots = (A_p)_{ij} = 0 \quad (i, j) \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

ในส่วนนี้จะอธิบายรายละเอียดปัญหาข้างต้นแปลงให้อยู่ในรูปเวกเตอร์ดังouh

$$\begin{aligned} & \underset{x,z}{\text{minimize}} && (1/2)\|y_{\text{vec}} - Gx - Fz\|_2^2 \\ & \text{subject to} && x_k = 0 \quad (k \in J) \end{aligned}$$

ในการแปลงปัญหาดังกล่าว สมมติให้ A, B อยู่ในรูป

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & \dots & A_p \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{q \times qp}, & A_i &\in \mathbb{R}^{q \times q}, \quad i = 1, 2, \dots, p \\ B &= \begin{bmatrix} B_1 & B_2 & \dots & B_q \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{q \times mr}, & B_i &\in \mathbb{R}^{q \times m}, \quad i = 1, 2, \dots, r \end{aligned}$$

และในสมการ (9) เนื่องจาก $H \in \mathbb{R}^{qp \times N}$ และ $K \in \mathbb{R}^{qp \times N}$ ดังนั้นเราสามารถเขียน H, K ใหม่ได้ว่า

$$H = \begin{bmatrix} H_1 \\ H_2 \\ \vdots \\ H_p \end{bmatrix}, \quad H_i \in \mathbb{R}^{q \times N}, \quad (i = 1, 2, \dots, p), \quad K = \begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ \vdots \\ K_r \end{bmatrix}, \quad K_i \in \mathbb{R}^{m \times N}, \quad (i = 1, 2, \dots, r)$$

ในปัญหา (9) เราสามารถเขียนฟังก์ชันจุดประสงค์ได้ใหม่ดังนี้ โดยสมมติให้ (s, t) คือดัชนีของตัวแปรเมทริกซ์ที่พิจารณา

$$\begin{aligned} \|Y - AH - BK\|_F^2 &= \sum_{s,t} (Y_{st} - (AH)_{st} - (BK)_{st})^2 \\ &= \sum_{s,t} \left(Y_{st} - \sum_{k=1}^{qp} A_{sk} H_{kt} - \sum_{k=1}^{mr} B_{sk} K_{kt} \right)^2 \end{aligned} \quad (31)$$

พิจารณาพจน์ $\sum_{k=1}^{qp} A_{sk} H_{kt}$, $\sum_{k=1}^{mr} B_{sk} K_{kt}$ จะสามารถกระจายได้ดังนี้

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{qp} A_{sk} H_{kt} &= \sum_{k=1}^q \underbrace{\left[(H_1)_{kt} \quad (H_2)_{kt} \quad \dots \quad (H_p)_{kt} \right]}_{\mathcal{H}_{kt}} \underbrace{\begin{bmatrix} (A_1)_{sk} \\ (A_2)_{sk} \\ \vdots \\ (A_p)_{sk} \end{bmatrix}}_{x_{sk}} \triangleq \sum_{k=1}^q \mathcal{H}_{kt} x_{sk} \\ \sum_{k=1}^{mr} B_{sk} K_{kt} &= \sum_{k=1}^m \underbrace{\left[(K_1)_{kt} \quad (K_2)_{kt} \quad \dots \quad (K_r)_{kt} \right]}_{\mathcal{K}_{kt}} \underbrace{\begin{bmatrix} (B_1)_{sk} \\ (B_2)_{sk} \\ \vdots \\ (B_q)_{sk} \end{bmatrix}}_{z_{sk}} \triangleq \sum_{k=1}^m \mathcal{K}_{kt} z_{sk} \end{aligned} \quad (32)$$

ดังนั้นกำหนดให้

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{kt} &= \begin{bmatrix} (H_1)_{kt} & (H_2)_{kt} & \dots & (H_p)_{kt} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times p} \\ \mathcal{K}_{kt} &= \begin{bmatrix} (K_1)_{kt} & (K_2)_{kt} & \dots & (K_r)_{kt} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times r} \\ x_{sk} &= \begin{bmatrix} (A_1)_{sk} \\ (A_2)_{sk} \\ \vdots \\ (A_p)_{sk} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^p, \quad z_{sk} = \begin{bmatrix} (B_1)_{sk} \\ (B_2)_{sk} \\ \vdots \\ (B_q)_{sk} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^r \end{aligned} \quad (33)$$

จะได้ว่าเมื่อนำสมการ (32) เรียงค่าโดยที่ $t = 1, 2, \dots, N$ และ s คงที่ จะสามารถเขียนอยู่ในรูปของเวกเตอร์ได้ดังนี้

$$\text{vec}(Y - AH - BK) = \begin{bmatrix} Y_{s1} \\ Y_{s2} \\ \vdots \\ Y_{sN} \end{bmatrix} - \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} & \dots & \mathcal{H}_{1q} \\ \mathcal{H}_{21} & \mathcal{H}_{22} & \dots & \mathcal{H}_{2q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{H}_{N1} & \mathcal{H}_{N2} & \dots & \mathcal{H}_{Nq} \end{bmatrix}}_{\mathcal{H}} \begin{bmatrix} x_{s1} \\ x_{s2} \\ \vdots \\ x_{sq} \end{bmatrix} - \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{K}_{11} & \mathcal{K}_{12} & \dots & \mathcal{K}_{1m} \\ \mathcal{K}_{21} & \mathcal{K}_{22} & \dots & \mathcal{K}_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathcal{K}_{N1} & \mathcal{K}_{N2} & \dots & \mathcal{K}_{Nm} \end{bmatrix}}_{\mathcal{K}} \begin{bmatrix} z_{s1} \\ z_{s2} \\ \vdots \\ z_{sm} \end{bmatrix} \quad (34)$$

เมื่อเขียนสมการ (31) โดยเรียงตาม $s = 1, 2, \dots, q$ จะได้ว่า

$$\text{vec}(Y - AH_BK) = \begin{bmatrix} Y_{11} \\ \vdots \\ Y_{1N} \\ Y_{21} \\ \vdots \\ Y_{qN} \end{bmatrix} - \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{H} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{H} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{H} \end{bmatrix}}_G \begin{bmatrix} x_{11} \\ \vdots \\ x_{1q} \\ x_{21} \\ \vdots \\ x_{qq} \end{bmatrix} - \underbrace{\begin{bmatrix} \mathcal{K} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{K} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{K} \end{bmatrix}}_F \begin{bmatrix} z_{11} \\ \vdots \\ z_{1m} \\ z_{21} \\ \vdots \\ z_{qm} \end{bmatrix}$$

ดังนั้นปัญหา (9) สามารถเขียนเป็นปัญหา (10) โดยค่าตัวแปรโดยมีนิยาม x_{sk}, z_{sk} ตามสมการ (34) เมื่อ $s = 1, 2, \dots, q, k = 1, 2, \dots, q$ หรือ

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{12} \\ \vdots \\ x_{1n} \\ x_{21} \\ \vdots \\ x_{qq} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{q^2p}, \quad z = \begin{bmatrix} z_{11} \\ z_{12} \\ \vdots \\ z_{1m} \\ z_{21} \\ \vdots \\ z_{nm} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{qmr}, \quad G = I_q \otimes \mathcal{H}, \quad F = I_q \otimes \mathcal{K}, \quad y_{\text{vec}} = \begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ \vdots \\ Y_{qN} \end{bmatrix}$$

11.3 ขั้นตอนวิธี ADMM

11.3.1 การใช้ ADMM รูปแบบปัญหาการประมาณแบบจำลอง ARX ที่บ่งชี้ถึงเงื่อนไขเกรนเจอร์

Alternating Direction Method of Multipliers หรือ ADMM เป็นหนึ่งในการแก้ปัญหาการหาค่าเหมาะสมสุดแบบคอนเวกซ์ มีขั้นตอนวิธีตามรูปแบบตาม (18) โดยในหัวข้อนี้ จะกล่าวถึงการใช้ ADMM สำหรับปัญหาการประมาณแบบจำลอง (13)

$$\underset{x,z}{\text{minimize}} \quad (1/2)\|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 + \lambda\|P\tilde{x}\|_{2,1}$$

จะแก้ปัญหาโดยการแยกฟังก์ชันออกเป็นหลายส่วนในปัญหา (13) จะแยกออกมาดังนี้

$$f(\tilde{x}, z) = (1/2)\|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 = (1/2)\left\|y_{\text{vec}} - \begin{bmatrix} \tilde{G} & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x} \\ z \end{bmatrix}\right\|_2^2$$

$$h(x) = \lambda\|x\|_{2,1}$$

เราสามารถเขียนปัญหา (13) อยู่ในรูปใหม่ได้ว่า

$$\begin{aligned} & \underset{x_1, x_2, x_3}{\text{minimize}} && f(x_1, x_2) + h(x_3) \\ & \text{subject to} && Px_1 = x_3 \end{aligned} \quad (35)$$

สมการ (13) สามารถเขียนสมการ augmented Lagrangian เพื่อมาแก้ปัญหาการหาค่าต่ำสุดของปัญหา (35) ในรูปของ $x_1 \in \mathbb{R}^{q^2p}, x_2 \in \mathbb{R}^{q(q-1)p}$ และ ตัวแปรคู่กัน (dual variable) $u \in \mathbb{R}^{q(q-1)p}$ ได้ว่า

$$\mathcal{L}_\rho(x_1, x_2, x_3, u) = f(x_1, x_2) + h(x_3) + u^T(Px_1 - x_3) + \frac{\rho}{2}\|Px_1 - x_3\|_2^2$$

ค่า $\rho > 0$ เรียกว่าค่าพารามิเตอร์ลงโทษที่ส่งผลต่อความเร็วของการลู่เข้าสู่คำตอบ เห็นได้จากค่าของ ρ ยิ่งมีค่าที่มากยิ่งส่งผลให้พจน์ $\|Px_1 - x_3\|_2^2 \rightarrow 0$ วิธี ADMM นั้นจะหาค่าต่ำสุดของ augmented Lagrangian ที่เกิดจาก x_1 โดยมอง x_2 ในการ update x_1 จากนั้น จะหาค่าต่ำสุดของ \mathcal{L}_ρ ที่เกิดจาก x_2 โดยมอง x_1 คงที่ วนซ้ำไปเรื่อยๆ โดยสามารถดูรายละเอียดได้จาก [19]

$$(x_1^+, x_2^+) = \underset{x_1, x_2}{\text{argmin}} \left(f(x_1, x_2) + u^T(Px_1 - x_3) + \frac{\rho}{2}\|Px_1 - x_3\|_2^2 \right) \quad (36)$$

$$x_3^+ = \underset{x_3}{\text{argmin}} \left(h(x_3) + u^T(Px_1^+ - x_3) + \frac{\rho}{2}\|Px_1^+ - x_3\|_2^2 \right) \quad (37)$$

$$u^+ = u + \rho(Px_1^+ - x_3^+) \quad (38)$$

เงื่อนไขหยุดของกระบวนการวนซ้ำคือ

$$\|Px_1^+ - x_3^+\|_2 \leq \epsilon^{\text{pri}} \quad \text{และ} \quad \rho\|P^T(x_2^+ - x_2)\|_2 \leq \epsilon^{\text{dual}}$$

การปรับค่า (x_1^+, x_2^+) ในสมการ (36) จะได้ว่าเทียบเท่ากับการแก้สมการ

$$\left(\begin{bmatrix} \tilde{G}^T \tilde{G} & \tilde{G}^T F \\ F^T \tilde{G} & F^T F \end{bmatrix} + \rho \begin{bmatrix} P^T P & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} x_1^+ \\ x_2^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G^T \\ F^T \end{bmatrix} y_{\text{vec}} + \begin{bmatrix} P^T \\ 0 \end{bmatrix} (\rho x_3 - u) \quad (39)$$

การจะสามารถแก้สมการ (39) เมทริกซ์ $\begin{bmatrix} \tilde{G}^T \tilde{G} & \tilde{G}^T F \\ F^T \tilde{G} & F^T F \end{bmatrix} + \rho \begin{bmatrix} P^T P & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ ต้องเป็น invertible matrix

การปรับค่า x_3^+ ในสมการ (37) สามารถจัดรูปใหม่เพื่อให้ง่ายต่อการแก้ปัญหาได้ว่า

$$x_3^+ = \underset{x_3}{\text{argmin}} \left(\lambda \|x_3\|_{2,1} + u^T (Px_1^+ - x_3) + \frac{\rho}{2} \|Px_1^+ - x_3\|_2^2 \right)$$

จากสมการ (37) สามารถเปลี่ยนรูปทั่วไปโดยให้ $w = Px_1^+ + u/\rho, \gamma = \lambda/\rho$ เป็นปัญหา

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad \gamma \|x\|_{2,1} + (1/2) \|x - w\|_2^2 \quad (40)$$

ปัญหา (40) สามารถแสดงให้เห็นว่ามีคำตอบในรูปแบบปิด ดูได้ในหัวข้อ 11.3.2

11.3.2 ขั้นตอนวิธีการคำนวณคำตอบของปัญหาการประมาณแบบจำลอง

ขั้นตอนการคำนวณ x_1^+, x_2^+ โครงสร้างของ G, F และ P ในสมการ (13) มีลักษณะดังนี้

$$G = \begin{bmatrix} \mathcal{H} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{H} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{H} \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} \mathcal{K} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{K} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{K} \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} P_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & P_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & P_n \end{bmatrix}$$

จากสมการ (39)

$$\left(\begin{bmatrix} G^T G & G^T F \\ F^T G & F^T F \end{bmatrix} + \rho \begin{bmatrix} P^T P & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \right) \begin{bmatrix} x_1^+ \\ x_2^+ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G^T \\ F^T \end{bmatrix} y_{\text{vec}} + \begin{bmatrix} P^T \\ 0 \end{bmatrix} (\rho x_3 - u)$$

การแก้สมการ (39) โดยการแก้สมการในการหาค่า x ก่อนแล้วค่อยหาค่า z โดยการแก้สมการดังนี้

$$\begin{aligned} (G^T G + \rho P^T P - G^T F (F^T F)^{-1} F^T G) x_1^+ &= G^T y_{\text{vec}} - G^T F (F^T F)^{-1} F^T y_{\text{vec}} + P^T (\rho x_3 - u) \\ F^T F x_2^+ &= F^T (y_{\text{vec}} - G x_1^+) \end{aligned} \quad (41)$$

เมื่อพิจารณาเมทริกในสมการ (41) สามารถเขียนอยู่ในรูป

$$y_{\text{vec}} = \begin{bmatrix} (y_{\text{vec}})_1 \\ (y_{\text{vec}})_2 \\ \vdots \\ (y_{\text{vec}})_q \end{bmatrix}, \quad x_1^+ = \begin{bmatrix} (x_1)_1^+ \\ (x_1)_2^+ \\ \vdots \\ (x_1)_q^+ \end{bmatrix}, \quad x_2^+ = \begin{bmatrix} (x_2)_1^+ \\ (x_2)_2^+ \\ \vdots \\ (x_2)_q^+ \end{bmatrix}, \quad x_3 = \begin{bmatrix} (x_3)_1 \\ (x_3)_2 \\ \vdots \\ (x_3)_q \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned}
G^T G + \rho P^T P - G^T F (F^T F)^{-1} F^T G &= \begin{bmatrix} \mathcal{Q}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{Q}_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{Q}_n \end{bmatrix} \\
G^T y_{\text{vec}} - G^T F (F^T F)^{-1} F^T y_{\text{vec}} + P^T (\rho x_2 - \mu) &= \begin{bmatrix} \mathcal{R}_1 \\ \mathcal{R}_2 \\ \vdots \\ \mathcal{R}_n \end{bmatrix} \\
F^T F &= \begin{bmatrix} \mathcal{K}^T \mathcal{K} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathcal{K}^T \mathcal{K} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathcal{K}^T \mathcal{K} \end{bmatrix} \\
F^T (y_{\text{vec}} - Gx) &= \begin{bmatrix} \mathcal{K}^T ((y_{\text{vec}})_1 - \mathcal{H}(x_1)_1^+) \\ \mathcal{K}^T ((y_{\text{vec}})_2 - \mathcal{H}(x_1)_2^+) \\ \vdots \\ \mathcal{K}^T ((y_{\text{vec}})_q - \mathcal{H}(x_1)_q^+) \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

โดยที่ $\mathcal{R}_i = \mathcal{H}^T (y_{\text{vec}})_i - \mathcal{H}^T \mathcal{K} (\mathcal{K}^T \mathcal{K})^{-1} \mathcal{K} (y_{\text{vec}})_i + P_i^T (\rho (x_3)_i - u_i)$ และ $\mathcal{Q}_i = \mathcal{H}^T \mathcal{H} + \rho P_i^T P_i - \mathcal{H}^T \mathcal{K} (\mathcal{K}^T \mathcal{K})^{-1} \mathcal{K}^T \mathcal{H}$ เมื่อ $i = 1, 2, \dots, q$ จะเห็นได้ว่าเราสามารถแก้สมการ (39) โดยการแก้สมการย่อย

$$\begin{aligned}
\mathcal{Q}_i (x_1)_i^+ &= \mathcal{R}_i \\
\mathcal{K}^T \mathcal{K} (x_2)_i^+ &= \mathcal{K}^T ((y_{\text{vec}})_i - \mathcal{H}(x_1)_i^+)
\end{aligned}$$

ขั้นตอนการคำนวณ x_3^+ จากสมการ (40) เรานิยามให้ $x_3 = [(x_3)_1^T \ (x_3)_2^T \ \dots \ (x_3)_L^T]^T$ และ $w = [w_1^T \ w_2^T \ \dots \ w_L^T]^T$

$$\underset{x_3}{\text{minimize}} \quad \gamma \|x_3\|_{2,1} + (1/2) \|x_3 - w\|_2^2$$

สมการ (40) สามารถเขียนใหม่ได้ว่า

$$\underset{(x_3)_1, (x_3)_2, \dots, (x_3)_L}{\text{minimize}} \quad \left(\gamma \|(x_3)_1\|_2 + (1/2) \|(x_3)_1 - w_1\|_2^2 \right) + \dots + \left(\gamma \|(x_3)_L\|_2 + (1/2) \|(x_3)_L - w_L\|_2^2 \right) \quad (42)$$

จาก (42) สามารถแยกเป็นกลุ่มย่อยๆ เพื่อหาค่า $(x_3)_i$ เมื่อ $i = 1, 2, \dots, L$ เป็นปัญหาย่อย

$$\underset{(x_3)_i}{\text{minimize}} \quad \gamma \|(x_3)_i\|_2 + (1/2) \|(x_3)_i - w_i\|_2^2 \quad (43)$$

และปัญหา (43) มีคำตอบเป็น

$$(x_3)_i^+ = \max \left\{ 1 - \frac{\gamma}{\|w_i\|_2}, 0 \right\} w_i$$

11.4 ปัญหาการประมาณแบบจำลองในรูปแบบ Lasso และ Group Lasso

การประมาณค่าพารามิเตอร์ในแบบจำลองต่างๆ เช่น แบบจำลอง AR, แบบจำลอง ARX, แบบจำลองปริภูมิสถานะ (state space model) หนึ่งในวิธีที่นิยมใช้ในการประมาณแบบจำลองคือวิธีกำลังสองต่ำสุด ด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดนี้การประมาณค่าพารามิเตอร์ให้ใกล้กับค่าจริงจำเป็นต้องใช้ข้อมูลที่มาก เพราะไม่มีการใส่ลักษณะของพารามิเตอร์บังคับเข้าไปในการประมาณ ถ้าพิจารณาถึงลักษณะของค่าพารามิเตอร์ที่ควรจะได้เข้าไปในการประมาณก็จะสามารถประมาณพารามิเตอร์ได้ดีขึ้น Lasso และ Group Lasso เป็นการประมาณค่าพารามิเตอร์ในรูปแบบหนึ่งที่ค่าพารามิเตอร์มีจำนวนของค่า 0 ในพารามิเตอร์ที่ควรประมาณได้จำนวนหนึ่ง โดยการเพิ่มฟังก์ชันลงโทษเข้าไปในฟังก์ชันจุดประสงค์

ปัญหา Lasso

ปัญหา Lasso เป็นปัญหาค่าลึงสองต่ำสุดที่มีการเพิ่มฟังก์ชันลงโทษแบบนอร์ม-1 เข้าไป เพื่อหารูปแบบของค่า 0 บนพารามิเตอร์ x ที่ต้องการประมาณจากปัญหาการประมาณพารามิเตอร์ด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุด [14] ดังสมการ

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad (1/2)\|Gx - y\|_2^2 + \lambda\|x\|_1 \quad (44)$$

ยกตัวอย่างปัญหา Lasso เช่นการประมาณกำลังสองต่ำสุดในรูปแบบของสเกลาร์

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad f(x) = \frac{1}{2}(ax - b)^2 + \lambda|x| \quad (45)$$

ปัญหา (45) $a \geq 0$ สามารถแบ่งได้เป็นสองกรณีคือ

- กรณี $x \geq 0$ $f(x) = \frac{1}{2}(ax - (b - \frac{\lambda}{a}))^2 + \frac{1}{2}(-(b - \frac{\lambda}{a})^2 + b^2)$
 $ax_{\min} = \begin{cases} b - \frac{\lambda}{a} & \text{เมื่อ } b \geq \frac{\lambda}{a} \\ 0 & \text{otherswise} \end{cases}$
- กรณี $x \leq 0$ $f(x) = \frac{1}{2}(ax - (b + \frac{\lambda}{a}))^2 + \frac{1}{2}(-2a\lambda - \lambda^2)$
 $ax_{\min} = \begin{cases} b + \frac{\lambda}{a} & \text{เมื่อ } b \leq -\frac{\lambda}{a} \\ 0 & \text{otherswise} \end{cases}$

หรือว่าเขียนอยู่ในรูป

$$x_{\min} = \begin{cases} \frac{\text{sign}(b)}{a} \left(|b| - \frac{\lambda}{a} \right) & |b| \geq \frac{\lambda}{a} \\ 0 & \text{otherswise} \end{cases}$$

จะเห็นได้ว่า ถ้าเพิ่ม $\lambda \geq |a|$ จะทำให้เกิดรูปแบบของ 0 ขึ้นมา

กรณี vector ในกรณีทั่วไปปัญหา lasso จะต้องเขียนตามปัญหา (44) จะมีความลำบากในการหา unique solution เพื่อจะดูค่า 0 ของคำตอบ เนื่องจาก $\|\cdot\|_1$ เป็นฟังก์ชันที่ไม่สามารถหาอนุพันธ์ที่ค่า $x = 0$ ดังนั้นจำเป็นต้องพิจารณาด้วยวิธี sub-gradient เมื่อให้ s คือ sub-gradient ของ $\|x\|_1$ sub-gradient ของปัญหา (44) จะเป็นดังนี้

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad h(x) = (1/2)\|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|x\|_1$$

$$\begin{aligned} \partial h(x) &= G^T(Gx - b) + \lambda s \\ G &= [g_1 \ g_2 \ \cdots \ g_n] \\ s &= [s_1 \ s_2 \ \cdots \ s_m]^T \\ s_i &= \begin{cases} \frac{x_i}{|x_i|} & \text{เมื่อ } x_i \neq 0 \\ [-1, 1] & \text{เมื่อ } x_i = 0 \end{cases} \\ \partial h_j(x) &= g_j^T(\sum_{i=1}^n g_i x_i - b) + \lambda s_j \end{aligned}$$

ถ้าปัญหา (44) มีคำตอบ $0 \in \partial h(x)$ ดังนั้นจะสามารถเห็นจากสมการด้านบนได้ว่า ถ้า $\lambda > g_j^T(\sum_{i=1, i \neq j}^n g_i x_i - b)$ แล้ว $x_j = 0$ จะเห็นได้ว่าเมื่อ λ มีค่ามากถึงระดับหนึ่งส่งผลให้เกิดค่า 0 ในคำตอบที่มากขึ้น

ปัญหา Group Lasso

Group lasso มีลักษณะคล้ายกับปัญหา Lasso แต่ปัญหาแบบ Group lasso ต้องการบังคับให้คำตอบมีค่า 0 พร้อมกันเป็นกลุ่ม

$$\underset{x}{\text{minimize}} \quad h(x) = (1/2)\|y - Gx\|_2^2 + \lambda \sum_{i=1}^L \|x_i\|_2 \quad (46)$$

จากสมการ (46) จะเห็นการจัดกลุ่มด้วยการจัดพารามิเตอร์ให้เป็นกลุ่มโดยผ่านนอร์ม-2 และ นำมาบวกกันทั้งหมดให้คล้ายกับลักษณะของนอร์ม-1 และจากสมการ (44) (46) และ เมื่อค่า λ มีค่ามากขึ้นส่งผลทำให้เกิดค่า 0 ในคำตอบมีค่ามากขึ้นโดยพิจารณา sub-gradient ของปัญหา (46) เป็นดังนี้

$$\partial h(x^*) = -G^T(b - Gx^*) + \lambda s(x^*) \quad (47)$$

โดย $s(x)$ เป็น sub-gradient ของ $\sum_{i=1}^L \|x_i\|_2$ พิจารณา $s(w)$ เมื่อ $w = [w_1^T \ w_2^T \ \dots \ w_L^T]^T$

$$s(w) = (s_1(w), s_1(w), \dots, s_L(w))$$

$$s_k(w) = \begin{cases} \frac{w_k}{\|w_k\|_2} & \text{if } w_k \neq 0 \\ \text{any vector that } \|s_k\|_2 \leq 1 & \text{if } w_k = 0 \end{cases}$$

ให้ $G = [G_1 \ G_2 \ \dots \ G_L]$ และ $x = [x_1^T \ x_2^T \ \dots \ x_L^T]^T$ เมื่อพิจารณาสมการ (47) ที่ block ที่ i แทนคำตอบของปัญหา (46) ใน $\partial h(x)$ ต้องมีค่า 0 เป็นสมาชิกใน $\partial h(x^*)$

$$0 \in \partial h(x^*) = -G_i^T(b - Gx^*) + \lambda s_i(x^*) \quad (48)$$

กำหนดให้ $q_i^* = b - \sum_{j=1, j \neq i}^L G_j x_j^*$ จะสามารถเปลี่ยนปัญหา (48) ให้เขียนอยู่ในรูป

$$0 \in -G_i^T(q_i^* - G_i x_i^*) + \lambda g_i(x^*) \quad (49)$$

เมื่อพิจารณาสมการ (49) เราสามารถพิสูจน์ได้ว่า ถ้า $\lambda > \|G_i^T q_i^*\|_2$ แล้ว $x_i^* = 0$ โดยจะพิสูจน์โดยใช้การขัดแย้ง

Proof จะพิสูจน์

$$\lambda > \|G_i^T q_i^*\|_2 \rightarrow x_i^* = 0 \quad (50)$$

โดยใช้การขัดแย้ง

ประโยคเริ่มต้น ให้ $\lambda > \|G_i^T q_i^*\|_2$ และ $x_i^* \neq 0$

พิสูจน์การขัดแย้ง เนื่องจาก $x_i^* \neq 0$ ดังนั้น $s_i(x^*) = \frac{x_i^*}{\|x_i^*\|_2}$ ดังนั้น

$$-G_i^T(q_i^* - G_i x_i^*) + \lambda s_i(x^*) = -G_i^T q_i^* + G_i^T G_i x_i^* + \lambda \frac{x_i^*}{\|x_i^*\|_2} = 0$$

คูณด้วย x_i^T ตลอดสมการ

$$\begin{aligned} -x_i^{*T} G_i^T q_i^* + x_i^{*T} G_i^T G_i x_i^* + \lambda \|x_i^*\|_2 &= 0 \\ x_i^{*T} G_i^T G_i x_i^* + \lambda \|x_i^*\|_2 &= x_i^{*T} G_i^T q_i^* \\ x_i^{*T} G_i^T G_i x_i^* + \lambda \|x_i^*\|_2 &= \|x_i^{*T} G_i^T q_i^*\|_2 \\ \|G_i x_i^*\|_2^2 + \lambda \|x_i^*\|_2 &\leq \|x_i^*\|_2 \|G_i^T q_i^*\|_2 \\ \|G_i^T q_i^*\|_2 &\geq \frac{\|G_i x_i^*\|_2^2}{\|x_i^*\|_2} + \lambda \geq \lambda \quad (\text{เกิดการขัดแย้ง}) \end{aligned}$$

λ_c ที่ทำให้คำตอบเกิดค่าศูนย์มากที่สุด

ปัญหา (44), (46) แสดงให้เห็นถึงการเกิดคำตอบที่เป็นศูนย์ขึ้นกับค่า λ ยิ่งค่า λ มีค่ามากก็ยิ่งทำให้เกิดค่าศูนย์ของคำตอบที่มาก หัวข้อนี้จะกล่าวถึง ค่า λ_c ที่ทำให้พจน์ทั้งหมดที่ให้เป็น Group lasso มีค่าเป็น 0 หรือ $\lambda \|P\tilde{x}\|_{2,1} = 0$ ในปัญหา (13)

$$\underset{\tilde{x}, z}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 + \lambda \|P\tilde{x}\|_{2,1}$$

เราสามารถเรียงค่า \tilde{x} และ \tilde{G} ดังนี้

$$\tilde{x} \triangleq \begin{bmatrix} x_p \\ x_q \end{bmatrix}, \quad \tilde{G} \triangleq [G_p \ G_q]$$

โดยที่ x_p คือค่า \tilde{x} ที่อยู่ใน $P\tilde{x}$, x_q คือค่า \tilde{x} ที่ไม่อยู่ใน $P\tilde{x}$ และ G_p, G_q คือ G ที่เรียง column ให้ตรงกับ x_p และ x_q ปัญหา (13) สามารถเปลี่ยนรูปเป็น

$$\underset{x_p, x_q, z}{\text{minimize}} \quad (1/2)\|y_{\text{vec}} - G_p x_p - G_q x_q - Fz\|_2^2 + \lambda \|x_p\|_{2,1} \quad (51)$$

ถ้าต้องการคำตอบของปัญหา (51) มีค่า $x_p^* = 0$ ค่า $\lambda > \lambda_c$ โดย λ_c สามารถดูจากประโยค (50) ได้ว่า

$$\underset{x_q, z}{\text{minimize}} \quad (1/2)\|y_{\text{vec}} - G_q x_q - Fz\|_2^2$$

$$\lambda_c = \max_i \|G_{p_i}^T q_i^*\|_2$$

ถ้า $x_p^* = 0$ แล้ว $q_i^* = q^* = y_{\text{vec}} - G_q x_q^* - Fz^*$ จากปัญหา (51) เราสามารถหาค่า x_q^*, z^*, q^* และ λ_c ได้ว่า

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} x_q^* \\ z^* \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} G_q^T G_q & G_q^T F \\ F^T G_q & F^T F \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} G_p^T \\ F^T \end{bmatrix} y_{\text{vec}} \\ R_{\text{proj}} &= [G_p \quad F] \begin{bmatrix} G_q^T G_q & G_q^T F \\ F^T G_q & F^T F \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} G_p^T \\ F^T \end{bmatrix} \\ q^* &= (I - R_{\text{proj}}) y_{\text{vec}} \\ \lambda_c &= \max_i \|G_{p_i}^T (I - R_{\text{proj}}) y_{\text{vec}}\|_2 \end{aligned}$$

11.5 วิธีการคำนวณค่า BIC ของแบบจำลอง ARX

หัวข้อนี้จะกล่าวถึงการเปลี่ยนวิธีการคำนวณค่า BIC ที่อยู่ในรูปสมการ (21) ให้อยู่ในรูปสมการ (23)

$$\text{BIC} = -2\mathcal{L} + d \log N$$

โดย N เป็นจำนวนข้อมูล, \mathcal{L} เป็นค่าลอการิทึมของฟังก์ชันความเป็นไปได้ (log likelihood function) และค่า d คือ จำนวนตัวแปรที่มีผลต่อการประมาณ ค่า \mathcal{L} มีนิยามว่า

$$\mathcal{L}(\theta) = \log(f(y|\theta))$$

$f(y|\theta)$ เรียกว่าฟังก์ชันความเป็นไปได้ $f(y|\theta)$ เป็นฟังก์ชันความหนาแน่นของความน่าจะเป็นแบบมีเงื่อนไข (conditional likelihood function) ของสัญญาณขาออก y สำหรับพารามิเตอร์ในแบบจำลอง θ ค่าหนึ่งๆ [17] ถ้าเราสมมติว่าระบบโครงสร้างเป็นแบบจำลอง ARX และมีข้อมูลสัญญาณขาออก $y(1), y(2), \dots, y(N)$, สัญญาณขาเข้า $u(1), u(2), \dots, u(N)$ และสัญญาณรบกวนแบบ gaussian noise $e \sim \mathcal{N}(0, \Sigma)$ เราสามารถหาฟังก์ชันความน่าจะเป็นได้ว่า

$$\begin{aligned} f(y|\theta) &= f(y|A, B, \Sigma) = f(y(p+1), \dots, y(N)|y(p), \dots, y(1), u(1), \dots, u(N)) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N-p}{2}}} \frac{1}{\det \Sigma^{\frac{N-p}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{2} \mathbf{tr}((Y - AH - BK)^T \Sigma^{-1} (Y - AH - BK))\right) \end{aligned}$$

โดย Y, H และ K มีการเรียงเมทริกซ์ตามสมการ (6) จากนิยามของ \mathcal{L} สามารถเขียนได้ว่า

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(A, B, \Sigma) &= \log(f(y|A, B, \Sigma)) \\ &= \frac{N-p}{2} \log \det \Sigma^{-1} - \frac{1}{2} \mathbf{tr}((Y - AH - BK)^T \Sigma^{-1} (Y - AH - BK)) \end{aligned} \quad (52)$$

เนื่องจาก Σ เป็น positive definite matrix ดังนั้น Σ^{-1} สามารถแยกออกมาในรูปของ $\Sigma^{-1} = L^T L$ ดังนั้นสมการ (52) สามารถเขียนอยู่ในรูปใหม่ได้ว่า

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(A, B, \Sigma) &= \frac{N-p}{2} \log \det \Sigma^{-1} - \frac{1}{2} \mathbf{tr}((Y - AH - BK)^T L^T L (Y - AH - BK)) \\ -2\mathcal{L}(A, B, \Sigma) &= (N-p) \log \det \Sigma + \|L(Y - AH - BK)\|_F^2 \end{aligned}$$

ในสมการ (22) เราสามารถจัดรูปใหม่ของ $\hat{\Sigma}$ โดยในเรียงเมทริกซ์ตามสมการ (6)

$$\begin{aligned} \hat{\Sigma} &= \frac{1}{N-p} \sum_{t=p+1}^N \hat{e}(t) e(t)^T \\ &= \frac{1}{N-p} (Y - \hat{A}H - \hat{B}K)(Y - \hat{A}H - \hat{B}K)^T \end{aligned} \quad (53)$$

พิจารณาพจน์ $\|L(Y - AH - BK)\|_F^2$ ที่แทนค่า $A = \hat{A}$, $B = \hat{B}$ และ $\Sigma = \hat{\Sigma}$

$$\begin{aligned} \|L(Y - \hat{A}H - \hat{B}K)\|_F^2 &= \mathbf{tr}((Y - \hat{A}H - \hat{B}K)^T L^T L(Y - AH - BK)) \\ &= \mathbf{tr}((Y - \hat{A}H - \hat{B}K)(Y - \hat{A}H - \hat{B}K)^T L^T L) \\ &= \mathbf{tr}((Y - \hat{A}H - \hat{B}K)(Y - \hat{A}H - \hat{B}K)^T \hat{\Sigma}^{-1}) \\ &= \mathbf{tr}((N - p)\hat{\Sigma}\hat{\Sigma}^{-1}) \\ &= q(N - p) \end{aligned}$$

ดังนั้น BIC จะสามารถเขียนในรูปได้ว่า

$$\text{BIC} = (N - p) \log \det \hat{\Sigma} + q(N - p) + d \log N$$

เนื่องจากค่า BIC เป็นค่าที่ใช้ในการเปรียบเทียบ ดังนั้นเมื่อลบหรือหารด้วยค่าคงที่ก็เพียงแต่ทำให้ระดับของเลขนัยสำคัญเปลี่ยนไปเท่านั้น เมื่อนำค่า BIC หารด้วย $N - p$ แล้วลบด้วย q จะได้ว่า

$$\text{BIC} = \log \det \hat{\Sigma} + \frac{d \log N}{N - p}$$

11.6 ชุดคำสั่ง MATLAB ที่ใช้ในโครงการ

gen_sparseARX เป็นฟังก์ชันที่สร้างแบบจำลองถดถอยตัวเองแบบมีสัญญาณขาเข้าภายนอก

- input : p, q, n, m, density
- output :A,B

gen_time_series เป็นฟังก์ชันที่สร้างอนุกรมเวลาจากแบบจำลอง ARX

$$y(t) = A_1 y(t - 1) + \dots + A_p y(t - p) + B_1 u(t - 1) + \dots + B_r u(t - r) + e(t)$$

- input : A, B, u, y(1), y(2), ..., y(p) และ noise_variance
- output : y

est_ARX_uncon เป็นฟังก์ชันที่ประมาณแบบจำลอง ARX วิธีกำลังสองต่ำสุดตามสมการ (5)

$$\underset{A,B}{\text{minimize}} \quad (1/2) \left(\sum_{t=p+1}^N \left\| y(t) - \sum_{j=1}^p A_j y(t-j) - \sum_{k=1}^r B_k u(t-k) \right\|_2^2 \right)$$

- input : y, u, p, q
- output : \hat{A} , \hat{B} , \hat{y}

est_ARX_zc เป็นฟังก์ชันที่ประมาณแบบจำลองถดถอยตัวเองแบบมีสัญญาณขาเข้าภายนอกด้วยวิธีกำลังสองต่ำสุดแบบมีเงื่อนไขไครนเจอร์ ตามสมการ (9)

$$\begin{aligned} &\underset{A,B}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|Y - AH - BK\|_F^2 \\ &\text{subject to} \quad (A_1)_{ij} = (A_2)_{ij} = \dots = (A_p)_{ij} = 0 \quad (i, j) \in I \end{aligned}$$

โดย est_ARX_zc มีฟังก์ชันย่อยคือ veccoefmat_ARX

- input : y, u, p, q, ind_z
- output : \hat{A} , \hat{B} , \hat{y}

veccoefmat_ARX เป็นฟังก์ชันที่เปลี่ยนเมทริกซ์ตามสมการ (9) ให้เป็นปัญหาเวกเตอร์ตามสมการ (10)

- input : Y, H, K
- output : G, F, y_{vec}

linindex เป็นฟังก์ชันที่สร้าง index ของการเปลี่ยนปัญหา (9) ให้อยู่ในรูปปัญหา (10)

- input : n, m, p
- output : **ind**

est_lasso_arx เป็นฟังก์ชันที่ประมาณแบบจำลอง ARX ตามปัญหา (12) ประกอบด้วย **linindex**, **sparse_arx_admm**

$$\begin{aligned} & \underset{A, B}{\text{minimize}} && (1/2) \|Y - AH - BK\|_F^2 + \lambda g(A) \\ & \text{subject to} && (A_1)_{ij} = (A_2)_{ij} = \dots = (A_p)_{ij} = 0 \quad (i, j) \in \mathcal{J} \end{aligned}$$

- input : y, u, p, q
- output : $\hat{A}, \hat{B}, \hat{y}, \text{non_zero_ind}$

sparse_arx_admm เป็นฟังก์ชันย่อยที่แก้ปัญหา (13)

$$\underset{x, z}{\text{minimize}} \quad (1/2) \|y_{\text{vec}} - \tilde{G}\tilde{x} - Fz\|_2^2 + \lambda \|P\tilde{x}\|_{2,1}$$

- input : A, B, u, y_{vec} และ λ
- output : $\hat{x}, \hat{z}, \text{non_zero_ind}$