

Nhập môn Học máy và Khai phá dữ liệu (IT3190)

Nguyễn Nhật Quang

quang.nguyennhat@hust.edu.vn

Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội
Viện Công nghệ thông tin và truyền thông
Năm học 2020-2021

Nội dung môn học:

- Giới thiệu về Học máy và Khai phá dữ liệu
- Tiền xử lý dữ liệu
- Đánh giá hiệu năng của hệ thống
- Hồi quy
- **Phân lớp**
 - **Bài toán phân lớp**
 - **Học dựa trên các láng giềng gần nhất (Nearest neighbors learning)**
- Phân cụm
- Phát hiện luật kết hợp

Bài toán phân lớp

- Phân lớp (classification) thuộc nhóm bài toán học có giám sát (supervised learning)
- Mục tiêu của bài toán phân lớp là dự đoán một giá trị rời rạc (kiểu định danh)

$$f: X \rightarrow Y$$

trong đó, Y là tập hữu hạn các giá trị rời rạc (discrete values)

Bài toán phân lớp: Đánh giá hiệu năng

$$Accuracy = \frac{1}{|D_{test}|} \sum_{x \in D_{test}} Identical(o(x), c(x));$$

$$Identical(a, b) = \begin{cases} 1, & \text{if } (a = b) \\ 0, & \text{if otherwise} \end{cases}$$

- x : Một ví dụ trong tập thử nghiệm D_{test}
- $o(x)$: Phân lớp đưa ra bởi hệ thống đối với ví dụ x
- $c(x)$: Phân lớp thực sự (đúng) đối với ví dụ x

Ma trận nhầm lẫn (Confusion matrix)

- Còn được gọi là Contingency Table
- **Chỉ được sử dụng đối với bài toán phân lớp**
 - Không thể áp dụng cho bài toán hồi quy (dự đoán)
- **TP_i** : Số lượng các ví dụ thuộc lớp c_i được phân loại chính xác vào lớp c_i
- **FP_i** : Số lượng các ví dụ không thuộc lớp c_i bị phân loại nhầm vào lớp c_i
- **TN_i** : Số lượng các ví dụ không thuộc lớp c_i được phân loại chính xác
- **FN_i** : Số lượng các ví dụ thuộc lớp c_i bị phân loại nhầm (vào các lớp khác c_i)

Lớp c_i		Được phân lớp bởi hệ thống	
		Thuộc	Ko thuộc
Phân lớp thực sự (đúng)	Thuộc	TP_i	FN_i
	Ko thuộc	FP_i	TN_i

Precision and Recall (1)

- Rất hay được sử dụng để đánh giá các hệ thống phân lớp văn bản (document classification)

- **Precision** đối với lớp c_i
 - Tổng số các ví dụ thuộc lớp c_i được phân lớp chính xác chia cho tổng số các ví dụ được phân lớp vào lớp c_i

$$Precision(c_i) = \frac{TP_i}{TP_i + FP_i}$$

- **Recall** đối với lớp c_i
 - Tổng số các ví dụ thuộc lớp c_i được phân lớp chính xác chia cho tổng số các ví dụ thuộc lớp c_i

$$Recall(c_i) = \frac{TP_i}{TP_i + FN_i}$$

Precision and Recall (2)

- Làm thế nào để tính toán được giá trị Precision và Recall (một cách tổng thể) cho toàn bộ các lớp $C=\{c_i\}$?

- Trung bình vi mô (Micro-averaging)

$$\text{Precision} = \frac{\sum_{i=1}^{|C|} TP_i}{\sum_{i=1}^{|C|} (TP_i + FP_i)} \quad \text{Recall} = \frac{\sum_{i=1}^{|C|} TP_i}{\sum_{i=1}^{|C|} (TP_i + FN_i)}$$

- Trung bình vĩ mô (Macro-averaging)

$$\text{Precision} = \frac{\sum_{i=1}^{|C|} \text{Precision}(c_i)}{|C|} \quad \text{Recall} = \frac{\sum_{i=1}^{|C|} \text{Recall}(c_i)}{|C|}$$

F_1

- Tiêu chí đánh giá F_1 là sự kết hợp của 2 tiêu chí đánh giá *Precision* và *Recall*

$$F_1 = \frac{2 \cdot \text{Precision} \cdot \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} = \frac{2}{\frac{1}{\text{Precision}} + \frac{1}{\text{Recall}}}$$

- F_1 là một **trung bình điều hòa (harmonic mean)** của các tiêu chí *Precision* và *Recall*
 - F_1 có xu hướng lấy giá trị gần với giá trị nào nhỏ hơn giữa 2 giá trị *Precision* và *Recall*
 - F_1 có giá trị lớn nếu cả 2 giá trị *Precision* và *Recall* đều lớn

Top-k accuracy

- Suitable for ranking (i.e., learning to rank) problems
 - E.g., Ranked lists resulted by a search/retrieval engine

$$Accuracy = \frac{1}{|D_{test}|} \sum_{x \in D_{test}} InList(ol(x), c(x))$$

- x is an example in the test set D_{test}
- $ol(x)$ is the ranked list of class labels produced by the system for the example x
- $c(x)$ is the true (expected/real) class label for the example x
- $InList(ol(x), c(x))$ is equal to 1 if the class label $c(x)$ appears in the ranked list $ol(x)$, and equal to 0 if otherwise

Học dựa trên các láng giềng gần nhất

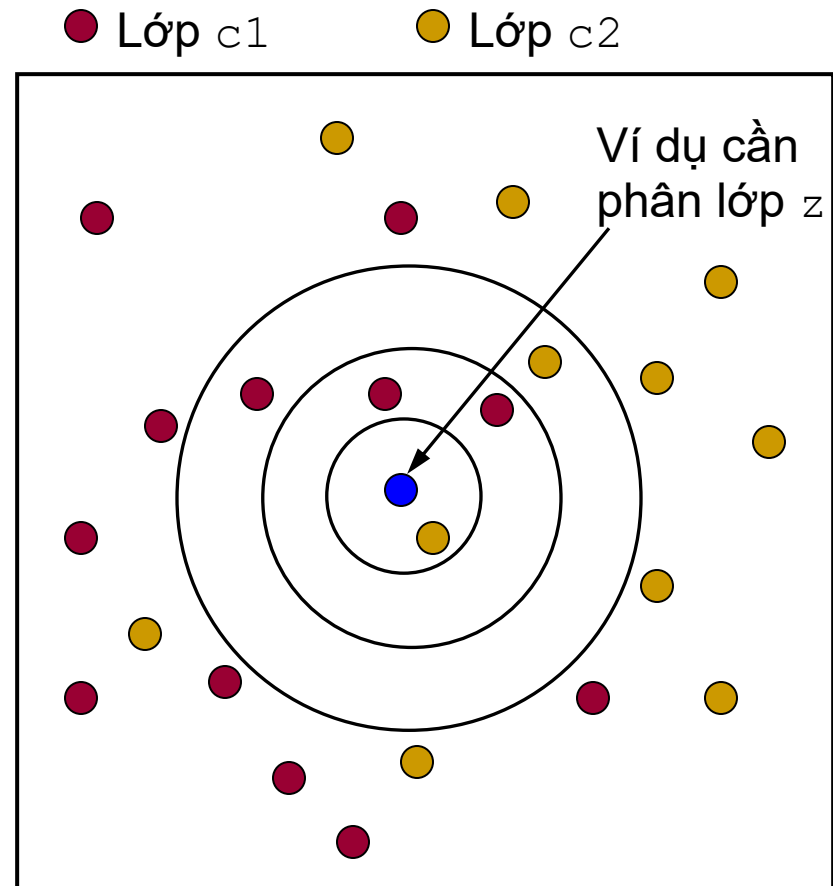
- Một số tên gọi khác của phương pháp học dựa trên các láng giềng gần nhất (Nearest neighbor learning)
 - Instance-based learning
 - Lazy learning
 - Memory-based learning
- Ý tưởng của phương pháp học dựa trên các láng giềng gần nhất
 - Với một tập các ví dụ học
 - (Đơn giản là) lưu lại các ví dụ học
 - Chưa xây dựng một mô hình (mô tả) rõ ràng và tổng quát của hàm mục tiêu cần học
 - Đối với một ví dụ cần phân loại/hồi quy
 - Xét quan hệ giữa ví dụ đó với các ví dụ học để gán giá trị của hàm mục tiêu (một nhãn lớp, hoặc một giá trị thực)

Học dựa trên các láng giềng gần nhất

- Biểu diễn đầu vào của bài toán
 - Mỗi ví dụ x được biểu diễn là một vector n chiều trong không gian các vector $X \in \mathbb{R}^n$
 - $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, trong đó $x_i (\in \mathbb{R})$ là một số thực
- Có thể áp dụng được với cả 2 kiểu bài toán học
 - Bài toán *phân lớp (classification)*
 - Hàm mục tiêu có giá trị rời rạc (a discrete-valued target function)
 - Đầu ra của hệ thống là một trong số các giá trị rời rạc đã xác định trước (một trong các nhãn lớp)
 - Bài toán *hồi quy (regression)*
 - Hàm mục tiêu có giá trị liên tục (a continuous-valued target function)
 - Đầu ra của hệ thống là một giá trị số thực

Ví dụ bài toán phân lớp

- Xét 1 láng giềng gần nhất
→ Gán z vào lớp c_2
- Xét 3 láng giềng gần nhất
→ Gán z vào lớp c_1
- Xét 5 láng giềng gần nhất
→ Gán z vào lớp c_1



Giải thuật phân lớp k-NN

- Mỗi ví dụ học x được biểu diễn bởi 2 thành phần:
 - Mô tả của ví dụ: $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, trong đó $x_i \in \mathbb{R}$
 - Nhãn lớp: $c \in C$, với C là tập các nhãn lớp được xác định trước)
- Giai đoạn học
 - Đơn giản là lưu lại các ví dụ học trong tập học: $D = \{x\}$
- Giai đoạn phân lớp: Để phân lớp cho một ví dụ (mới) z
 - Với mỗi ví dụ học $x \in D$, tính khoảng cách giữa x và z
 - Xác định tập $NB(z)$ – các láng giềng gần nhất của z
 - Gồm k ví dụ học trong D gần nhất với z tính theo một hàm khoảng cách d
 - Phân z vào lớp chiếm số đông (the majority class) trong số các lớp của các ví dụ học trong $NB(z)$

Giải thuật hồi quy k-NN

- Mỗi ví dụ học x được biểu diễn bởi 2 thành phần:
 - Mô tả của ví dụ: $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, trong đó $x_i \in \mathbb{R}$
 - Giá trị đầu ra mong muốn: $y_x \in \mathbb{R}$ (là một số thực)
- Giai đoạn học
 - Đơn giản là lưu lại các ví dụ học trong tập học D
- Giai đoạn dự đoán: Để dự đoán giá trị đầu ra cho ví dụ z
 - Đối với mỗi ví dụ học $x \in D$, tính khoảng cách giữa x và z
 - Xác định tập $NB(z)$ – các láng giềng gần nhất của z
 - Gồm k ví dụ học trong D gần nhất với z tính theo một hàm khoảng cách d
 - Dự đoán giá trị đầu ra đối với z :

$$y_z = \frac{1}{k} \sum_{x \in NB(z)} y_x$$

Một hay nhiều láng giềng gần nhất?

- Việc phân lớp (hay dự đoán) chỉ dựa trên duy nhất một láng giềng gần nhất (là ví dụ học gần nhất với ví dụ cần phân lớp/dự đoán) thường *không* chính xác
 - Nếu ví dụ học này là một ví dụ bất thường, không điển hình (an outlier) – rất khác so với các ví dụ khác
 - Nếu ví dụ học này có nhãn lớp (giá trị đầu ra) sai – do lỗi trong quá trình thu thập (xây dựng) tập dữ liệu
- Thường xét k (>1) các ví dụ học (các láng giềng) gần nhất với ví dụ cần phân lớp/dự đoán
- Đối với bài toán phân lớp có 2 lớp, k thường được chọn là một số lẻ, để tránh cân bằng về tỷ lệ các ví dụ giữa 2 lớp
 - Ví dụ: $k=3, 5, 7, \dots$

Hàm tính khoảng cách (1)

■ Hàm tính khoảng cách d

- Đóng vai trò rất quan trọng trong phương pháp học dựa trên các láng giềng gần nhất
- Thường được xác định trước, và không thay đổi trong suốt quá trình học và phân loại/dự đoán

■ Lựa chọn hàm khoảng cách d

- *Các hàm khoảng cách hình học*: Dành cho các bài toán có các thuộc tính đầu vào là kiểu số thực ($x_i \in \mathbb{R}$)
- *Hàm khoảng cách Hamming*: Dành cho các bài toán có các thuộc tính đầu vào là kiểu nhị phân ($x_i \in \{0,1\}$)
- *Hàm tính độ tương tự Cosine*: Dành cho các bài toán phân lớp văn bản (x_i là giá trị trọng số TF/IDF của từ khóa thứ i)

Hàm tính khoảng cách (2)

■ Các hàm tính khoảng cách hình học (Geometry distance functions)

- Hàm Minkowski (p -norm):

$$d(x, z) = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - z_i|^p \right)^{1/p}$$

- Hàm Manhattan ($p=1$):

$$d(x, z) = \sum_{i=1}^n |x_i - z_i|$$

- Hàm Euclid ($p=2$):

$$d(x, z) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - z_i)^2}$$

- Hàm Chebyshev ($p=\infty$):

$$d(x, z) = \lim_{p \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^n |x_i - z_i|^p \right)^{1/p} \\ = \max_i |x_i - z_i|$$

Hàm tính khoảng cách (3)

■ Hàm khoảng cách Hamming

- Đối với các thuộc tính đầu vào là kiểu nhị phân ($\{0,1\}$)
- Ví dụ: $x=(0,1,0,1,1)$

$$d(x, z) = \sum_{i=1}^n \text{Difference}(x_i, z_i)$$

$$\text{Difference}(a, b) = \begin{cases} 1, & \text{if } (a \neq b) \\ 0, & \text{if } (a = b) \end{cases}$$

■ Hàm tính độ tương tự Cosine

- Đối với đầu vào là một vector các giá trị trọng số (TF/IDF) của các từ khóa

$$\text{sim}(x, z) = \frac{x \cdot z}{\|x\| \|z\|} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i z_i}{\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n z_i^2}}$$

Chuẩn hóa miền giá trị thuộc tính

- Hàm tính khoảng cách Euclid:
$$d(x, z) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - z_i)^2}$$
- Giả sử mỗi ví dụ được biểu diễn bởi 3 thuộc tính: Age, Income (cho mỗi tháng), và Height (đo theo mét)
 - $x = (\text{Age}=20, \text{Income}=12000, \text{Height}=1.48)$
 - $z = (\text{Age}=40, \text{Income}=13000, \text{Height}=1.85)$
- Khoảng cách giữa x và z
 - $d(x, z) = [(20-40)^2 + (12000-13000)^2 + (1.48-1.85)^2]^{1/2}$
 - Giá trị khoảng cách bị quyết định chủ yếu bởi giá trị khoảng cách (sự khác biệt) giữa 2 ví dụ đối với thuộc tính Income
 - Vì: Thuộc tính Income có miền giá trị rất lớn so với các thuộc tính khác
- Cần phải chuẩn hóa miền giá trị (đưa về cùng một khoảng giá trị)
 - Khoảng giá trị $[0,1]$ thường được sử dụng
 - Đối với mỗi thuộc tính i : $x_i = x_i / \max_val(f_i)$

Trọng số của các thuộc tính

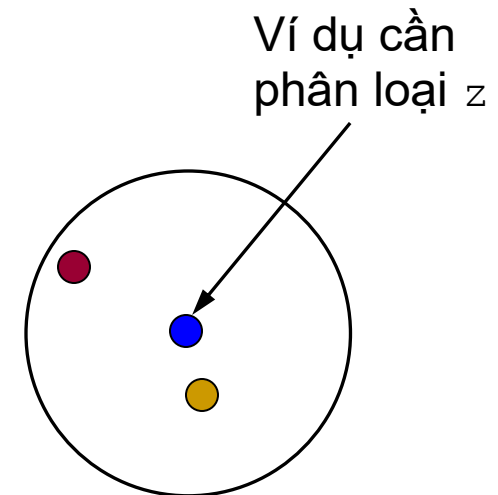
- Hàm khoảng cách Euclid:

$$d(x, z) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - z_i)^2}$$

- Tất cả các thuộc tính có cùng (như nhau) ảnh hưởng đối với giá trị khoảng cách
- **Các thuộc tính khác nhau có thể (nên) có mức độ ảnh hưởng khác nhau** đối với giá trị khoảng cách
- Cần phải tích hợp (đưa vào) các giá trị trọng số của các thuộc tính trong hàm tính khoảng cách
$$d(x, z) = \sqrt{\sum_{i=1}^n w_i (x_i - z_i)^2}$$
 - w_i là trọng số của thuộc tính i :
- Làm sao để xác định các giá trị trọng số của các thuộc tính?
 - Dựa trên các tri thức cụ thể của bài toán (vd: được chỉ định bởi các chuyên gia trong lĩnh vực của bài toán đang xét)
 - Bằng một quá trình tối ưu hóa các giá trị trọng số (vd: sử dụng một tập học để học một bộ các giá trị trọng số tối ưu)

Khoảng cách của các láng giềng (1)

- Xét tập $NB(z)$ – gồm k ví dụ học gần nhất với ví dụ cần phân lớp/dự đoán z
 - Mỗi ví dụ (láng giềng gần nhất) này có khoảng cách khác nhau đến z
 - Các láng giềng này có ảnh hưởng như nhau đối với việc phân lớp/dự đoán cho z ? → KHÔNG!
- Cần gán các mức độ ảnh hưởng (đóng góp) của mỗi láng giềng gần nhất tùy theo khoảng cách của nó đến z
 - Mức độ ảnh hưởng cao hơn cho các láng giềng gần hơn!



Khoảng cách của các láng giềng (2)

- Gọi v là hàm xác định trọng số theo khoảng cách

- Đối với một giá trị $d(x, z)$ – khoảng cách giữa x và z
- $v(x, z)$ tỷ lệ nghịch với $d(x, z)$

- Đối với bài toán phân lớp: $c(z) = \arg \max_{c_j \in C} \sum_{x \in NB(z)} v(x, z) \cdot \text{Identical}(c_j, c(x))$

$$\text{Identical}(a, b) = \begin{cases} 1, & \text{if } (a = b) \\ 0, & \text{if } (a \neq b) \end{cases}$$

- Đối với bài toán dự đoán (hồi quy): $f(z) = \frac{\sum_{x \in NB(z)} v(x, z) \cdot f(x)}{\sum_{x \in NB(z)} v(x, z)}$

- Lựa chọn một hàm xác định trọng số theo khoảng cách:

$$v(x, z) = \frac{1}{\alpha + d(x, z)}$$

$$v(x, z) = \frac{1}{\alpha + [d(x, z)]^2}$$

$$v(x, z) = e^{-\frac{d(x, z)^2}{\sigma^2}}$$

Lazy learning vs. Eager learning

- **Lazy learning.** Việc đánh giá hàm mục tiêu (target function) được hoãn lại cho đến khi xét ví dụ cần phân loại/dự đoán
 - Đánh giá (xấp xỉ) hàm mục tiêu *một cách cục bộ (locally)* và *riêng rẽ (diferrently)* cho mỗi ví dụ cần phân loại/dự đoán (*tại thời điểm phân loại/dự đoán của hệ thống*)
 - Tính toán nhiều lần các xấp xỉ *cục bộ* của hàm mục tiêu
 - Thường mất thời gian lâu hơn để đưa ra kết luận (phân lớp/dự đoán), và cần nhiều không gian nhớ hơn
 - Ví dụ: Nearest neighbor learner, Locally weighted regression
- **Eager learning.** Việc đánh giá hàm mục tiêu được hoàn thành trước khi xét đến bất kỳ ví dụ cần phân loại/dự đoán
 - Đánh giá (xấp xỉ) hàm mục tiêu *một cách tổng thể (globally)* đối với toàn bộ không gian các ví dụ (*tại thời điểm học của hệ thống*)
 - Tính toán một xấp xỉ *duy nhất (ở mức tổng thể)* của hàm mục tiêu
 - Ví dụ: Linear regression, Support vector machines, Neural networks, ...

k-NN – Khi nào?

- Các ví dụ được biểu diễn trong không gian vectơ \mathbb{R}^n
- Số lượng các thuộc tính (để biểu diễn ví dụ) là không nhiều
- Một tập học có kích thước lớn
- Các ưu điểm
 - Chi phí thấp cho quá trình huấn luyện (chỉ việc lưu lại các ví dụ học)
 - Hoạt động tốt với các bài toán phân loại gồm nhiều lớp
 - Không cần phải học n bộ phân loại cho n lớp
 - Phương pháp học k-NN ($k \gg 1$) có khả năng xử lý nhiễu cao
 - Phân loại/dự đoán được thực hiện dựa trên k láng giềng gần nhất
- Các nhược điểm
 - Xác định giá trị cho tham số k (hoặc ngưỡng lựa chọn về sự khác biệt)
 - Phải lựa chọn hàm tính khoảng cách (sự khác biệt) thích hợp với bài toán
 - Chi phí tính toán (thời gian, bộ nhớ) cao tại thời điểm phân loại/dự đoán
 - Có thể cho kết quả kém/sai với các thuộc tính không liên quan