Nội dung môn học

- Lecture 1: Giới thiệu về Học máy và khai phá dữ liệu
- Lecture 2: Thu thập và tiền xử lý dữ liệu
- Lecture 3: Hồi quy tuyến tính (Linear regression)
- Lecture 4+5: Phân cụm
- Lecture 6: Phân loại và Đánh giá hiệu năng
- Lecture 7: dựa trên láng giềng gần nhất (KNN)
- Lecture 8: Cây quyết định và Rừng ngẫu nhiên
- **Lecture 9: Học dựa trên xác suất**
- Lecture 10: Mạng nơron (Neural networks)
- Lecture 11: Máy vector hỗ trợ (SVM)
- Lecture 12: Khai phá tập mục thường xuyên và các luật kết hợp
- Lecture 13: Thảo luận ứng dụng trong thực tế

Expectation maximization

Expectation maximization

GMM

- Xét việc học GMM, với K phân phối Gaussian, từ dữ liệu huấn luyện $\mathbf{D} = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M\}$.
- Hàm mật độ $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi}) = \sigma_{k=1}^{K} \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$
  - $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_K)$ chứa cho trọng số của từng phân phối $P(z = k|\,\boldsymbol{\phi}) = \phi_k$
  - Mỗi Gaussian đa biến có hàm mật độ:

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}\,|\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\boldsymbol{\Sigma}_k)}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_k)\right]$$

- MLE cố gắng cực đại hàm log-likelihood sau:

$$L(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^{M} \log \sum_{k=1}^{K} \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_i \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

- Không thể tìm được công thức nghiệm cụ thể!
- **Naïve gradient decent** : lặp hai bước sau cho đến khi hội tụ
  - Tối ưu hóa L ($\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\phi}$) theo biến $\boldsymbol{\phi}$, khi cố định ($\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\Sigma}$).
  - Tối ưu hóa L ($\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\Sigma}$, $\boldsymbol{\phi}$) theo biến ($\boldsymbol{\mu}$, $\boldsymbol{\Sigma}$), khi cố định $\boldsymbol{\phi}$.

GMM và K-means

- **GMM:** ta cần biết
  - Trong số K Gaussian, phân bố nào sinh ra dữ liệu **x**
    chỉ số z của phân bố đó
  - Tham số của từng phân phối:
    $(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k, \phi_k)$

- **K-means:**
  - Trong số K cụm thì x thuộc về cụm nào?
    Chỉ số z của cụm
  - Tham số của từng cụm: Tâm cụm

- Ý tưởng cho GMM
  - $P(z|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi})$?
    (chú ý $\sigma_{k=1}^{K} P(z = k|\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi}) = 1$)
    (gán "mềm" vào các cụm)
  - Cập nhật tham số cho từng phân bố Gaussian: $(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k, \phi_k)$

- **Huấn luyện K-means:**
  - Bước 1: phân bổ mỗi $\boldsymbol{x}$ vào cụm gần nhất
    (gán nhãn cụm cho từng x)
    (cách gán "cứng nhắc")
  - Bước 2: tình toán lại tâm các cụm

GMM: cận dưới

- Ý tưởng của GMM?
  - Bước 1: tính $P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi})$? (note $\sigma_{k=1}^{K} P(z=k|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi})=1$)
  - Bước 2: Cập nhật tham số cho các phân bố: $\boldsymbol{\theta}=(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi})$

- Xét hàm log-likelihood

$$L(\boldsymbol{\theta})=\log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})=\sum_{i=1}^{M}\log\sum_{k=1}^{K}\phi_k\mathcal{N}(\boldsymbol{x}_i|\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k)$$

  - Quá phức tạp nếu trực tiếp sử dụng đạo hàm
  - Lưu ý rằng

$$\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})=\log\sum_{z}P(z,\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})=\log\sum_{z}P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$$

BĐT Jensen

$$=\log\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}}P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})\geq\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}}\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})=\sum_{z}P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})\log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$$

- Tối đa hóa $L(\boldsymbol{\theta})$ có thể được thực hiện bằng cách tối đa hóa giới hạn dưới $\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}}\log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$

GMM: cực đại hoá cận dưới

- Ý tưởng của GMM?
  - Bước 1: tính $P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi})$? (note $\sigma_{k=1}^{K} P(z=k|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi}) = 1$)
  - Bước 2: Cập nhật tham số cho từng phân phối Gaussian: $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi})$

- Quy tắc Bayes: $P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}) = P(\boldsymbol{x}|z,\boldsymbol{\theta})P(z|\boldsymbol{\phi})/P(\boldsymbol{x}) = \phi_z \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\mu}_z,\boldsymbol{\Sigma}_z)/C$, trong đó $C = \sigma_k\, \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\,\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k)$ là hằng số chuẩn hóa.
  - Có nghĩa là người ta có thể tính $P(z \mid \boldsymbol{x}, \boldsymbol{\theta})$ nếu biết $\boldsymbol{\theta}$
  - Đặt $T_{ki} = P(z=k|\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{\theta})$ với mọi $k = \overline{1,K}, i = \overline{1,M}$
- Còn về $\boldsymbol{\phi}$ thì sao?
  - $\phi_z = P(z|\boldsymbol{\phi}) = P(z|\boldsymbol{\theta}) = \int P(z,\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{x} = \int P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})d\boldsymbol{x} =$

    $\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}}\big(P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta})\big) \approx \frac{1}{M}\sigma_{\boldsymbol{x}\in D} P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{M}\sigma_{i=1}^{M} T_{zi}$
- Khi đó, cận dưới có thể được cực đại hóa theo mỗi phân bố $(\boldsymbol{\mu}_k,\boldsymbol{\Sigma}_k)$:

$$\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{D}} \sum_{z} P(z|\boldsymbol{x},\boldsymbol{\theta}) \log P(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\theta})$$

$$= \sum_{i=1}^{M} \sum_{k=1}^{K} T_{ki} \left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1} (\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k) - \log\sqrt{\det(2\pi\boldsymbol{\Sigma}_k)} \right]$$

GMM: Thuật toán EM

- **Đầu vào**: dữ liệu huấn luyện $\boldsymbol{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_M\}, K > 0$
- **Đầu ra**: tham số mô hình $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi})$
- Khởi tạo $\left(\boldsymbol{\mu}^{(0)}, \boldsymbol{\Sigma}^{(0)}, \boldsymbol{\phi}^{(0)}\right)$ một cách ngẫu nhiên
  - $\boldsymbol{\phi}^{(0)}$ phải không âm và tổng bằng 1.
- Tại lần lặp t:
  - *Bước E:* tính $T_{ki} = P\left(z = k \middle| \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}^{(t)}\right) = \phi_k^{(t)} \mathcal{N}\left(\boldsymbol{x} \middle| \boldsymbol{\mu}_k^{(t)}, \boldsymbol{\Sigma}_k^{(t)}\right)/C$ cho mọi *k*, *i*
  - *Bước M:* cập nhật cho mọi *k*

$$\phi_k^{(t+1)} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^{M} T_{ki}\ ;\ \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} = \frac{1}{M\phi_k} \sum_{i=1}^{M} T_{ki} \boldsymbol{x}_i\ ;$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)} = \frac{1}{M\phi_k} \sum_{i=1}^{M} T_{ki} \left(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}\right)\left(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}\right)^T$$

- Nếu không hội tụ, chuyển đến bước lặp t + 1.

GMM: Thuật toán EM

- **Đầu vào**: dữ liệu huấn luyện $\boldsymbol{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \dots, \boldsymbol{x}_M\}, K > 0$
- **Đầu ra**: tham số mô hình $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \boldsymbol{\phi})$
- Khởi tạo $\left(\boldsymbol{\mu}^{(0)}, \boldsymbol{\Sigma}^{(0)}, \boldsymbol{\phi}^{(0)}\right)$ một cách ngẫu nhiên
  - $\boldsymbol{\phi}^{(0)}$ phải không âm và tổng bằng 1.
- Tại lần lặp t:
  - *Bước E:* tính $T_{ki} = P\left(z = k \middle| \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{\theta}^{(t)}\right) = \phi_k^{(t)} \mathcal{N}(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{\mu}_k^{(t)}, \boldsymbol{\Sigma}_k^{(t)})/C$ cho mọi *k, i*
  - *Bước M:* cập nhật cho mọi *k*

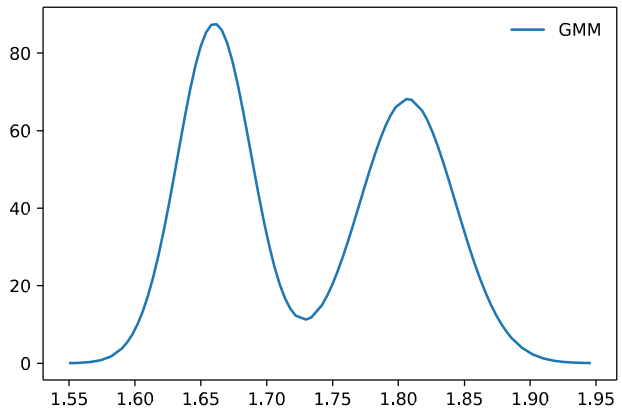
$$\phi_k^{(t+1)} = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} T_{ki}\,;\ \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)} = \frac{1}{M\phi_k}\sum_{i=1}^{M} T_{ki}\boldsymbol{x}_i\,;$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_k^{(t+1)} = \frac{1}{M\phi_k}\sum_{i=1}^{M} T_{ki}\left(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}\right)\left(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{\mu}_k^{(t+1)}\right)^T$$

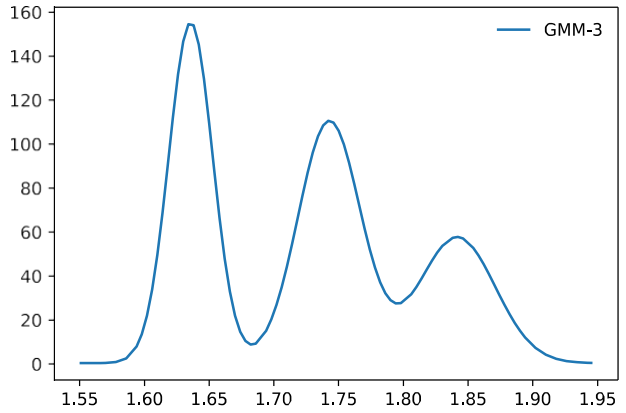
- Nếu không hội tụ, chuyển đến bước lặp t + 1.

GMM: Ví dụ 1

- Chúng ta mong muốn mô hình hóa chiều cao của một người
  - Chúng ta đã có dữ liệu thu thập thừ 10 người ở Hà Nội và 10 Người ở Sysney: **D**={1.60, 1.70, 1.65, 1.63, 1.75, 1.71, 1.68, 1.72, 1.77, 1.62, 1.75, 1.80, 1.85, 1.65, 1.91, 1.78, 1.88, 1.79, 1.82, 1.81}



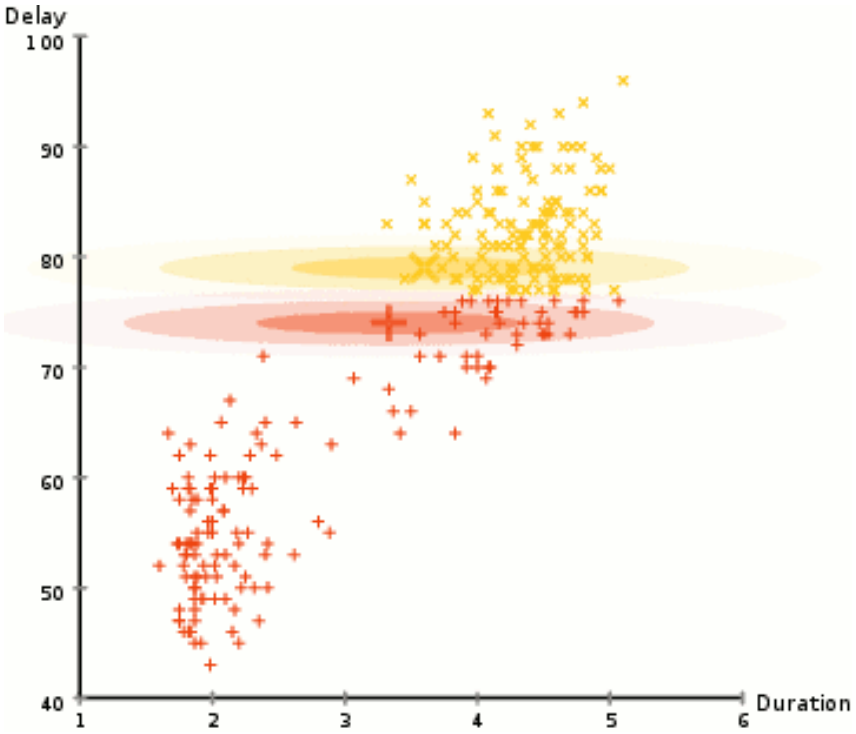
GMM với
2 phân bố con

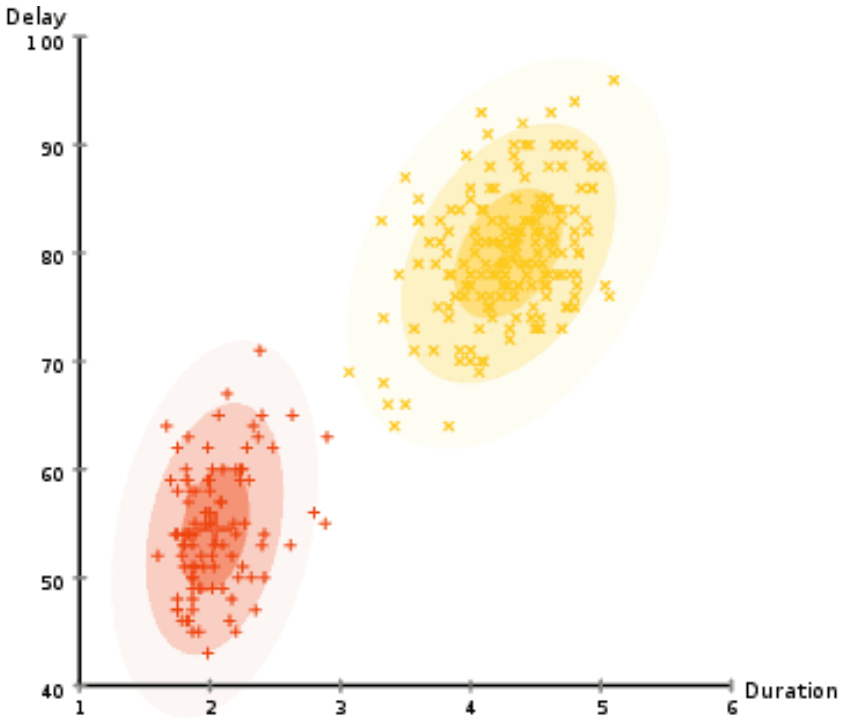


GMM với
3 phân bố con

GMM: Ví dụ 2

- GMM được huấn luyện trên bộ dữ liệu hai chiều

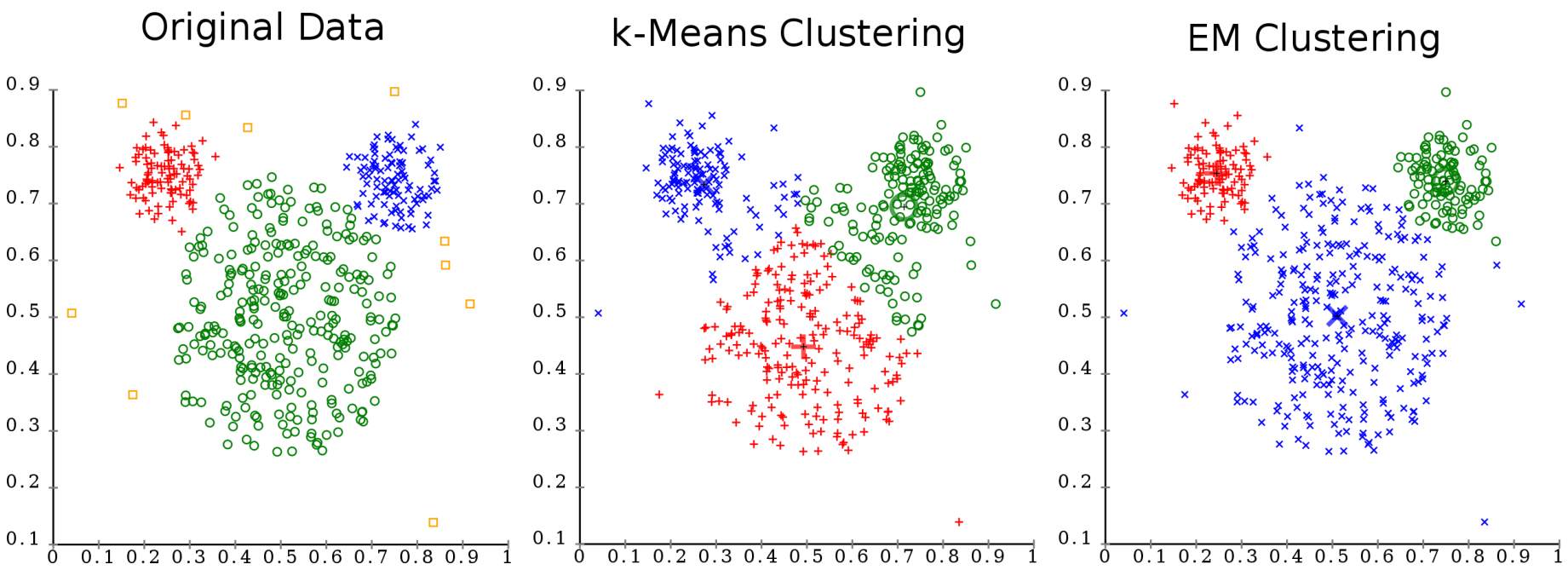




GMM: so sánh với K-means

- **K-means:**
  - Bước 1: phân bổ cứng nhắc
  - Bước 2: tìm tâm cụm
    → hình dạng các cụm là giống nhau?
- **GMM:**
  - Gán "mềm" dữ liệu vào các cụm
  - Tham số $(\boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k, \phi_k)$
    →hình dáng các cụm có thể khác nhau

Different cluster analysis results on "mouse" data set:



https://en.wikipedia.org/wiki/Expectation-maximization_algorithm

Mô hình tổng quát

- Chúng ta có thể áp dụng thuật toán EM trong các trường hợp tổng quát hơn.
- Xét một mô hình B($\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{z}$; $\boldsymbol{\theta}$) với biến quan sát được x, biến ẩn z và được tham số hóa bởi $\boldsymbol{\theta}$
  - x phụ thuộc vào z và $\boldsymbol{\theta}$, trong khi z có thể phụ thuộc vào $\boldsymbol{\theta}$
  - Mô hình hỗn hợp: mỗi điểm dữ liệu được quan sát có một biến ẩn tương ứng, chỉ định component tạo ra điểm dữ liệu
- Việc học là tìm một mô hình cụ thể, từ họ mô hình được tham số hóa bởi $\boldsymbol{\theta}$, mà giúp hàm log-likelihood trên dữ liệu huấn luyện D đạt cực đại:

$$\boldsymbol{\theta}^* = \text{argmax}_{\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$$

- Giả sử D bao gồm các mẫu độc lập, hàm log-likehood $\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$ có thể tính toán dễ dàng
  - Do có một biến ẩn, MLE có thể không có công thức nghiệm tường minh

Thuật toán EM

- Thuật toán Expectation maximization (EM) được giới thiệu vào năm 1977 bởi Arthur Dempster, Nan Laird và Donald Rubin.
- EM cực đại hoá cận dưới của hàm log-likelihood:

$$\mathrm{L}(\boldsymbol{\theta};\boldsymbol{D}) = \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta}) \geq \mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta}) = \sum_{z} P(z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}) \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$$

- Khởi tạo: $\boldsymbol{\theta}^{(0)}, \quad t = 0$
- Tại lần lặp t:
  - ***Bước E:*** tính hàm kỳ vọng Q khi cố định giá trị $\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ đã biết ở bước trước

$$Q\left(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right) = \mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}^{(t)}} \log P\left(\boldsymbol{D}\middle|\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

  - ***Bước M:*** tìm điểm $\boldsymbol{\theta}^{(t+1)}$ mà làm cho hàm Q đạt cực đại

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \mathrm{argmax}_{\boldsymbol{\theta}}\, Q\left(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\theta}^{(t)}\right)$$

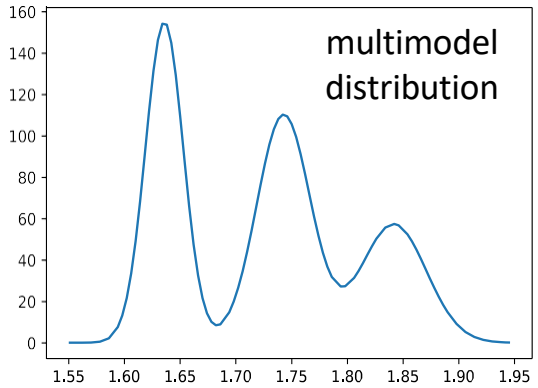
- Nếu không hội tụ, chuyển đến bước lặp t + 1.

EM: điều kiện hội tụ

- Các điều kiện khác nhau có thể được sử dụng để kiểm tra sự hội tụ
  - $\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$ không thay đổi nhiều giữa hai lần lặp liên tiếp
  - $\boldsymbol{\theta}$ không thay đổi nhiều giữa hai lần lặp lại liên tiếp
- Trong thực tế, đôi khi chúng ta cần giới hạn số lần lặp tối đa

EM: vài tính chất

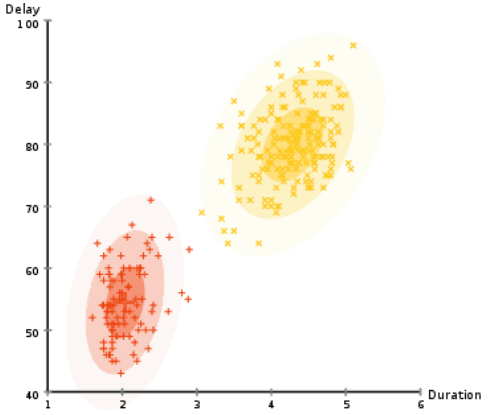
- Thuật toán EM được đảm bảo trả về một điểm dừng của cận dưới $\mathbb{E}_{Z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$
  - Đó có thể là tối đa cục bộ
- Do cực đại hoá cận dưới, EM không nhất thiết phải trả về nghiệm tối ưu
  - Không có lý thuyết để đảm bảo
  - Trong các trường hợp phức tạp (vd, multimodel), khi mà hàm log-likelihood là không lồi



- Thuật toán Baum-Welch là trường hợp đặc biệt của EM cho các mô hình Markov ẩn

EM, mô hình hỗn hợp và phân cụm

- **Mô hình hỗn hợp**: giả sử tập dữ liệu bao gồm K thành phần (phân bố) khác nhau và mỗi quan sát được tạo ra từ một trong các phân bố đó
  - Ví dụ: mô hình hỗn hợp Gaussian, mô hình hỗn hợp Multinomial, mô hình hỗn hợp Bernoulli,…
  - Hàm mật độ hỗn hợp có thể được viết dưới dạng



$$f(\boldsymbol{x};\boldsymbol{\theta},\boldsymbol{\phi}) = \sum_{k=1}^{K} \phi_k f_k(\boldsymbol{x}\mid\boldsymbol{\theta}_k)$$

trong đó $f_k(\boldsymbol{x}\mid\boldsymbol{\theta}_k)$ là hàm mật độ của phân phối thứ k

- Một phân bố hỗn hợp tạo ra một cách chia không gian dữ liệu ra thành các vùng khác nhau, mà mỗi vùng tương ứng với 1 thành phần trong hỗn hợp đó
- Do đó, các mô hình hỗn hợp cung cấp các phương pháp để phân cụm
- EM cung cấp một cách tự nhiên để học các mô hình hỗn hợp

EM: hạn chế

- Khi cận dưới $\mathbb{E}_{z|\boldsymbol{D},\boldsymbol{\theta}} \log P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\theta})$ không cho phép tính toán kỳ vọng hoặc tối ưu hóa dễ dàng
  - Mô hình hỗn hợp, mô hình hỗn hợp Bayes
  - Mô hình xác suất phân cấp
  - Mô hình phi tham số
- EM tìm ước lượng điểm, do đó dễ dàng bị kẹt ở mức tối ưu cục bộ
- Trong thực tế, EM nhạy cảm với việc khởi tạo
  - Sử dụng ý tưởng về K-mean++ để khởi tạo?
- Đôi khi EM hội tụ chậm trong thực tế

Chủ đề thêm

- Variational inference
  - Suy diễn cho các mô hình tổng quát hơn
- Deep generative models
  - Mạng nơron + lý thuyết xác suất
- Mạng nơron Bayes
  - Mạng nơron + Suy luận Bayes
- Amortized inference
  - Mạng nơron để thực hiện suy diễn Bayes
  - Học cách suy diễn

Tài liệu tham khảo

- Blei, David M., Alp Kucukelbir, and Jon D. McAuliffe. "Variational inference: A review for statisticians." *Journal of the American Statistical Association* 112, no. 518 (2017): 859-877.
- Blundell, Charles, Julien Cornebise, Koray Kavukcuoglu, and Daan Wierstra. "Weight Uncertainty in Neural Network." In *International Conference on Machine Learning (ICML)*, pp. 1613-1622. 2015.
- Dempster, A.P.; Laird, N.M.; Rubin, D.B. (1977). "Maximum Likelihood from Incomplete Data via the EM Algorithm". *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*. 39 (1): 1-38.
- Gal, Yarin, and Zoubin Ghahramani. "Dropout as a bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning." In *ICML*, pp. 1050-1059. 2016.
- Ghahramani, Zoubin. "Probabilistic machine learning and artificial intelligence." *Nature* 521, no. 7553 (2015): 452-459.
- Kingma, Diederik P., and Max Welling. "Auto-encoding variational bayes." In *International Conference on Learning Representations* (ICLR), 2014.
- Jordan, Michael I., and Tom M. Mitchell. "Machine learning: Trends, perspectives, and prospects." *Science* 349, no. 6245 (2015): 255-260.
- Tosh, Christopher, and Sanjoy Dasgupta. "The Relative Complexity of Maximum Likelihood Estimation, MAP Estimation, and Sampling." In *COLT, PMLR* 99:2993-3035, 2019.
- Sontag, David, and Daniel Roy, "Complexity of inference in latent dirichlet allocation" in: *Advances in Neural Information Processing System*, 2011.