ĐẠI HỌC BÁCH KHOA HÀ NỘI

VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG

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

Nội dung môn học

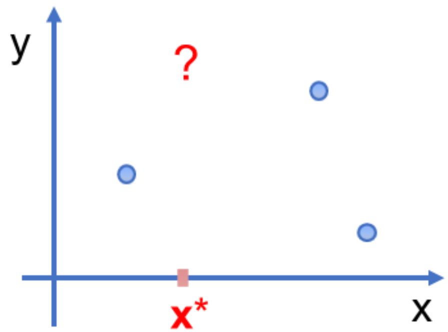
- Lecture 1: Giới thiệu về Học máy và khai phá dữ liệu
- Lecture 2: Thu thập và tiền xử lý dữ liệu
- Lecture 3: Hồi quy tuyến tính (Linear regression)
- Lecture 4+5: Phân cụm
- Lecture 6: Phân loại và Đánh giá hiệu năng
- Lecture 7: dựa trên láng giềng gần nhất (KNN)
- Lecture 8: Cây quyết định và Rừng 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

Tại sao cần mô hình hóa xác suất?

- Việc suy diễn từ dữ liệu thương không chắc chắn
- Lý thuyết xác suất: mô hình hóa tính không chắc chắn thay vì bỏ qua tình chất này.
- Việc suy diễn và dự đoán có thể thực hiện được nhờ vào công cụ xác suất
- Ứng dụng trong: Học máy, khai phá dữ liệu, tri giác máy tình, NLP, công nghệ tin sinh,…
- Mục đích bài giảng:
  - Cái nhìn tổng quan về mô hình hóa xác suất
  - Các khái niệm quan trọng
  - Ứng dụng trong bài toán phân lớp

Dữ liệu

- Gọi D=$\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_M, y_M)\}$ là tập dữ liệu cỡ M
  - Mỗi quan sát x_i là một biến n chiều
    vd: $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, \ldots, x_{in})$ với mỗi chiều là một thuộc tính.
  - y là đầu ra đơn biến
- Dự đoán: cho vào tập dữ liệu D, có thể nhận xét gì về y^* cho một giá trị x^* chưa biết.



- Để dự đoán, chúng ta cần có giả thuyết
- Mô hình (model) **H** mã hóa những giả thuyết này và thường phụ thuộc vào một vài tham số θ, ví dụ:

$$y = f(x|\theta)$$

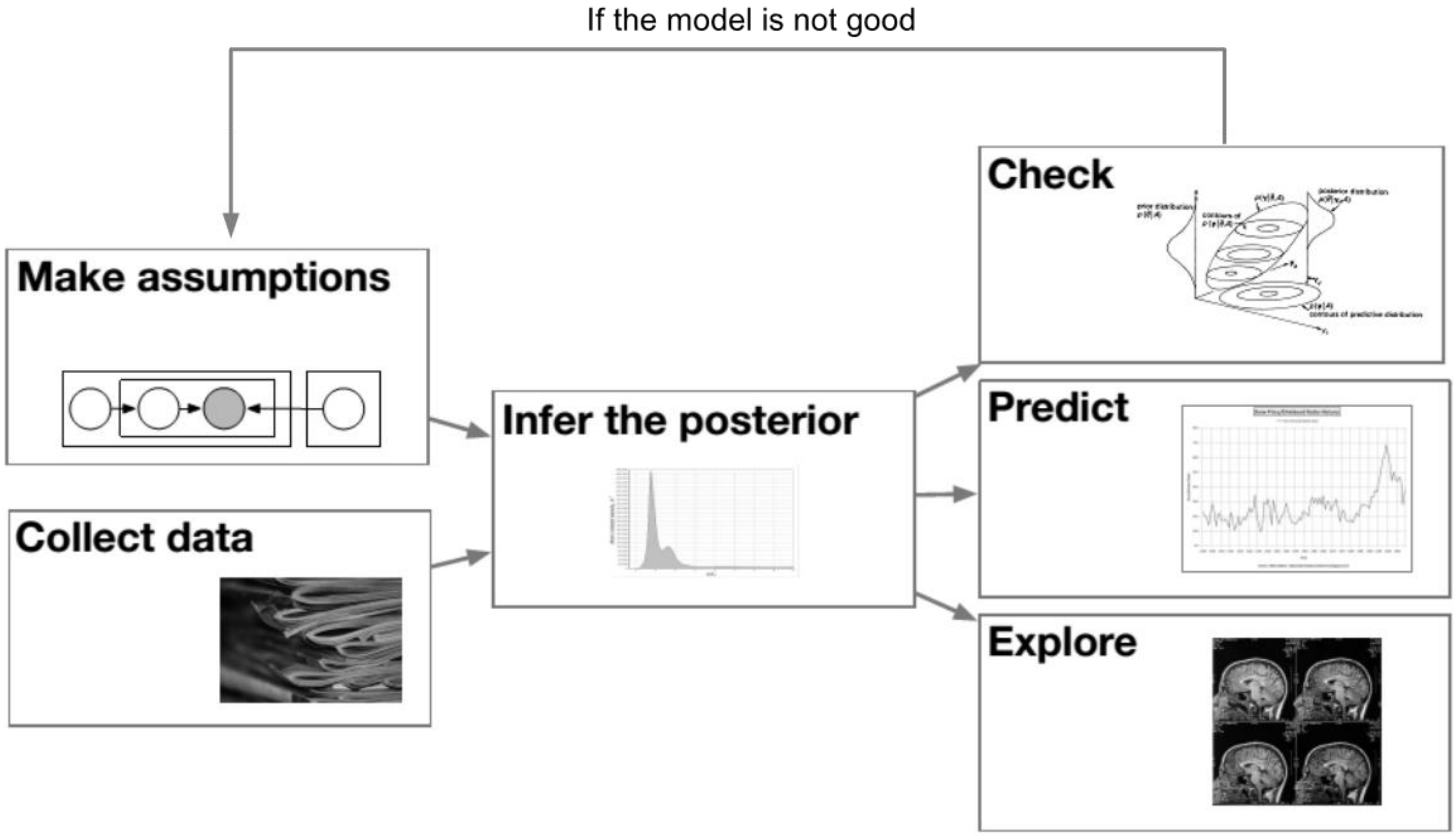
- Quá trình học chính là tìm được H từ tập D.

Sự không chắc chắn

- Sự không chắc chắn xuất hiện trong bất kỳ bước nào
  - Sự không chắc chắn do đo đạc (D)
  - Sự không chắc chắn của tham số (θ)
  - Sự không chắc chắn về tính chính xác của mô hình (H)
- Sự không chắc chắn do đo đạc
  - Sự không chắc chắn có thể xảy ra ở cả đầu vào và đầu ra?
- Làm thế nào để biểu diễn sự không chắc chắn?

-> Lý thuyết xác suất

Quá trình mô hình hóa



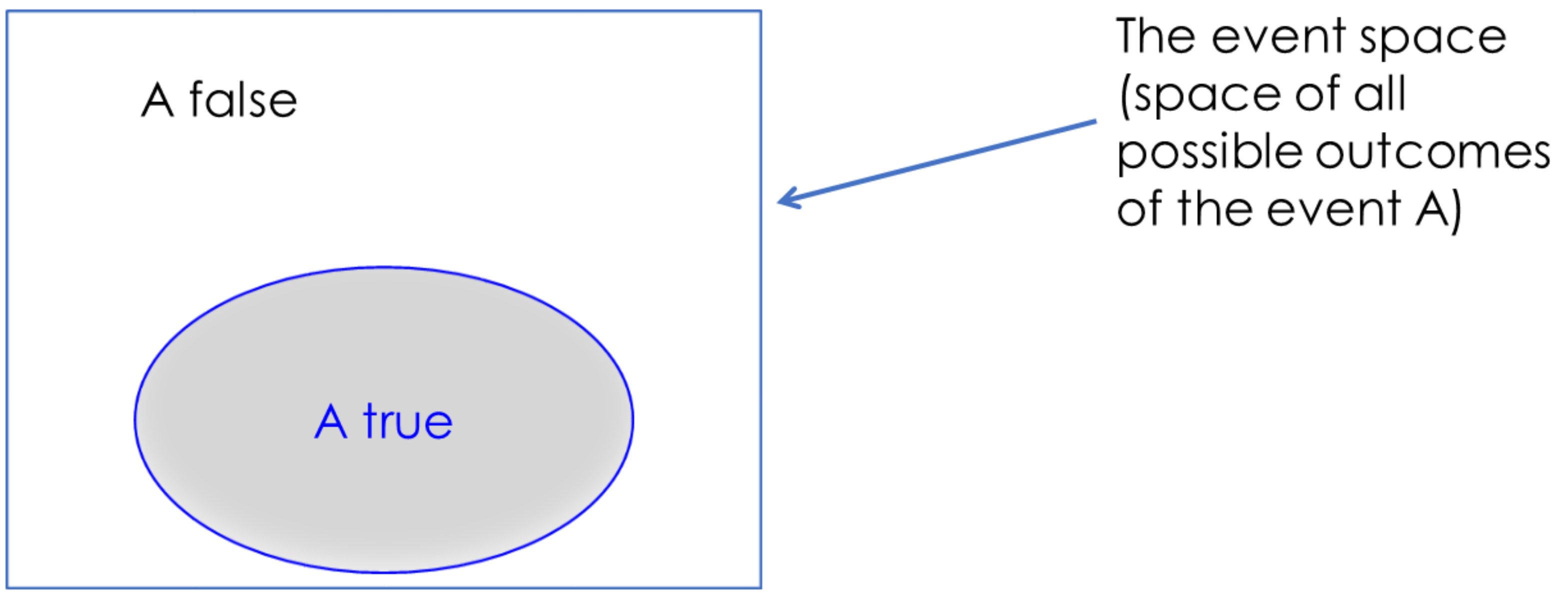
Lý thuyết xác suất cơ bản

Các khái niệm cơ bản

- Giả sử thực hiện thử nghiệm với các kết quả ngẫu nhiên, Ví dụ: tung một con xúc xắc.
- Không gian S của kết quả: tập hợp tất cả các kết quả có thể có của một phép thử
  - Ví dụ: S = {1, 2, 3, 4, 5, 6} cho việc tung con xúc xắc
- Sự kiện E: một tập con của không gian kết quả S.
  - Vd: E = {1} sự kiện con xúc xắc xuất hiện 1.
  - Vd: E = {1, 3, 5} trường hợp con xúc xắc xuất hiện lẻ.
- Không gian W của sự kiện: không gian của tất cả các sự kiện có thể xảy ra
  - Ví dụ: W chứa tất cả các lần tung có thể
- Biến ngẫu nhiên: đại diện cho một sự kiện ngẫu nhiên và có xác suất xuất hiện liên quan của sự kiện đó.

Biểu diễn xác suất

- Xác suất biểu diễn cho khả năng một sự kiện A có thể xảy ra.
  - Ký hiệu bởi $P(A)$
- $P(A)$ là tỉ lệ của phần không gian con mà A là đúng.



Biến ngẫu nhiên nhị phân

- Một biến ngẫu nhiên nhị phân (boolean) chỉ có thể nhận giá trị Đúng hoặc Sai.
- Một số tiên đề:
  - $0 \leq P(A) \leq 1$
  - P (true) = 1
  - P (false) = 0
  - P (A hoặc B) = $P(A) + P(B) - P(A, B)$
- Một số hệ quả:
  - P (không phải A) = P (~ A) = 1 - P (A)
  - P (A) = P (A, B) + P (A, ~ B)

Các biến ngẫu nhiên đa thức

- Một biến ngẫu nhiên đa thức có thể nhận một từ K giá trị có thể có của $\{v_1, v_2, \ldots, v_k\}$.

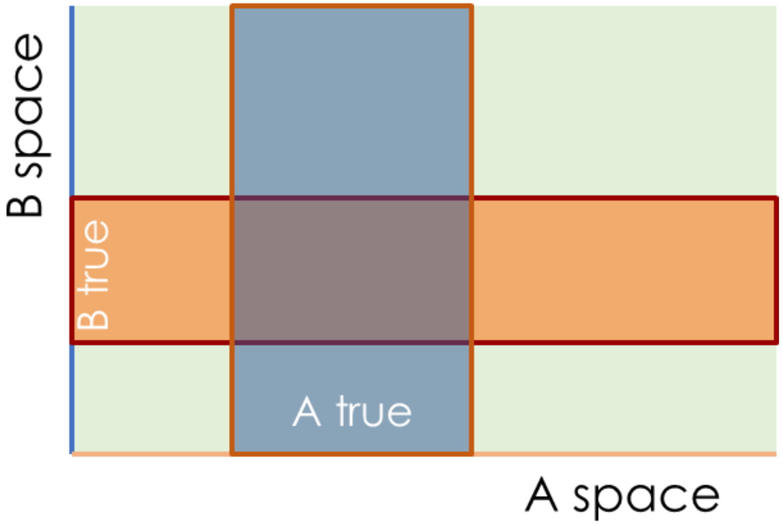
- $P(A = v_i, A = v_j) = 0 \text{ nếu } i \neq j$

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{m} (A = v_n)\right) = \sum_{n=1}^{m} P(A = v_n)$$

$$P\left(\bigcup_{n=1}^{k} (A = v_n)\right) = \sum_{n=1}^{k} P(A = v_n) = 1$$

Xác suất đồng thời

- Xác suất đồng thời:
  - Khả năng xảy ra của A và B cùng lúc.
  - $P(A, B)$ là tỷ lệ của không gian trong đó cả A và B đều đúng.

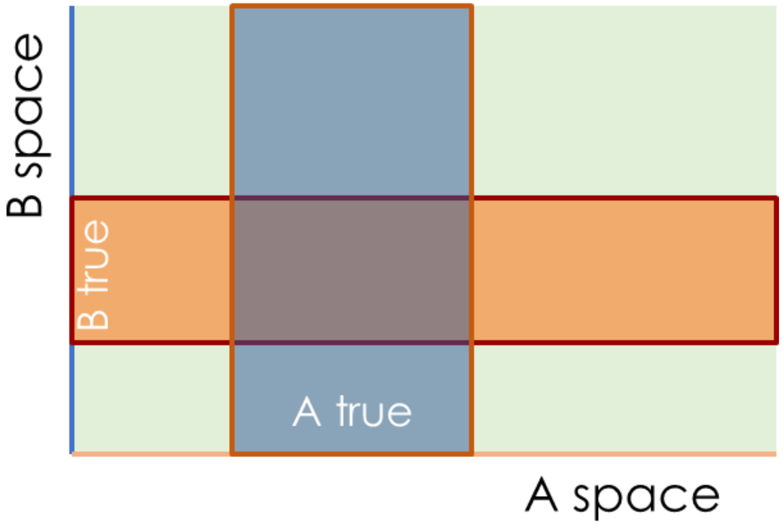


- Ví dụ:
  - A: Tôi sẽ chơi bóng đá vào ngày mai.
  - B: John sẽ không chơi bóng đá.
  - P (A, B): xác suất mà ngày mai tôi sẽ chơi bóng còn John thì không.

Xác suất đồng thời (2)

- Ký hiệu S_A là không gian của A
- Ký hiệu S_B là không gian của B
- Ký hiện S_{AB} là không gian của biến đồng thời (A, B)

$$S_{AB} = S_A \times S_B$$



- Khi đó:

$$P(A, B) = |T_{AB}|/|S_{AB}|$$

  - T_{AB} là không gian mà cả A và B đều đúng
  - $|X|$ là kích thước của không gian X

Xác suất có điều kiện

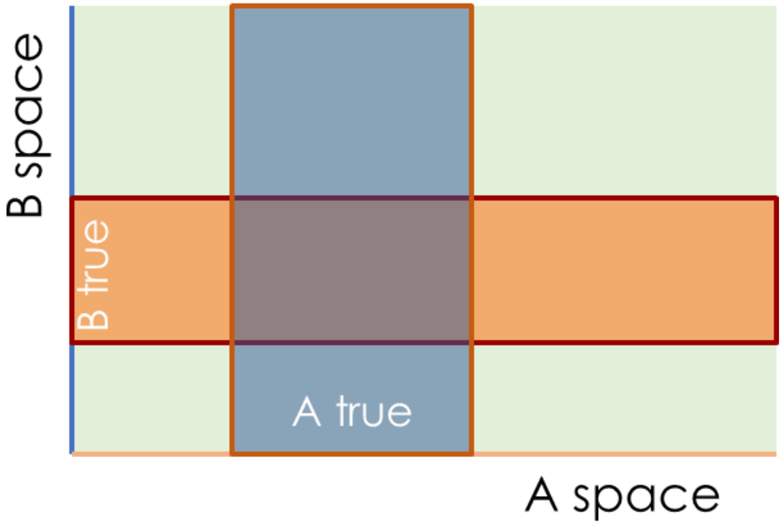
- Xác suất có điều kiện:
  - $P(A|B)$: khả năng A xảy ra khi B đã xảy ra.
  - $P(A|B)$: là tỉ lệ của không gian trong đó A xảy ra, biết rằng B đúng.
- Ví dụ:
  - A: Tôi sẽ chơi bóng đá vào ngày mai.
  - B: ngày mai trời sẽ không mưa.
  - P (A | B): xác suất để tôi đá bóng đá, với điều kiện ngày mai trời không mưa.
- Sự khác nhau giữa xác suất đồng thời và xác suất có điều kiện?

Xác suất có điều kiện (2)

- Xác suất có điều kiện:

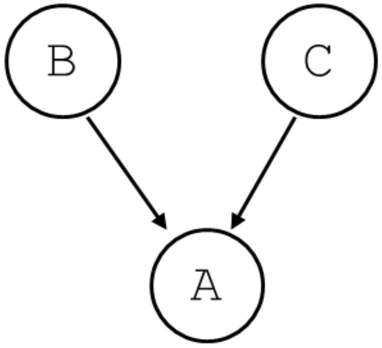
$$P(A|B) = \frac{P(A,B)}{P(B)}$$

- Một số hệ quả:
  - $P(A,B) = P(A|B).P(B)$
  - $P(A|B) + P(\sim A|B) = 1$
  - $\sum_{i=1}^{k} P(A = v_i|B) = 1$



Xác suất có điều kiện

- $P(A|B,C)$ là xác suất của A cho rằng B và C đã xảy ra.



P(A|B,C)

- Ví dụ:
  - A: Sáng mai, tôi sẽ đi lang thang gần sông.
  - B: Thời tiết sáng mai rất đẹp.
  - C: Tôi sẽ thức dậy sớm vào sáng mai.
  - P (A | B, C): xác suất đi lang thang qua gần con sông, với điều kiện trời rất đẹp và sáng mai tôi sẽ thức dậy sớm.

Độc lập thống kê

- Hai sự kiện A và B được gọi là **Độc lập thống kê** nếu xác suất A xảy ra không thay đổi bởi sự kiện B.
$$P(A|B) = P(A)$$
- Ví dụ:
  - A: Tôi sẽ chơi bóng vào ngày mai.
  - B: Biển Thái Bình Dương có nhiều cá.
  - $P(A|B) = P(A)$: việc biển Thái Bình Dương chứa nhiều cá không ảnh hưởng đến quyết định chơi bóng vào ngày mai của tôi.

Độc lập thống kê

- Giả sử $P(A|B) = P(A)$, ta có:
  - $P(\sim A|B) = P(\sim A)$
  - $P(B|A) = P(B)$
  - $P(A, B) = P(A).P(B)$
  - $P(\sim A, B) = P(\sim A).P(B)$
  - $P(A, \sim B) = P(A).P(\sim B)$
  - $P(\sim A, \sim B) = P(\sim A).P(\sim B)$

Độc lập có điều kiện

- Hai biến cố A và C được gọi là **Độc lập có điều kiện** cho trước B nếu $P(A|B,C) = P(A|B)$
- Ví dụ:
  - A: Tôi sẽ chơi bóng vào ngày mai.
  - B: trận đấu bóng đá sẽ diễn ra trong nhà vào ngày mai.
  - C: ngày mai trời sẽ không mưa.
  - $P(A|B,C) = P(A|B)$

Một số quy luật

- Luật chuỗi:
  - $P(A,B) = P(A|B).P(B) = P(B|A).P(A) = P(B,A)$
  - $P(A|B) = \frac{P(A,B)}{P(B)} = P(B|A).\frac{P(A)}{P(B)}$
  - $P(A,B|C) = \frac{P(A,B,C)}{P(C)} = P(A|B,C).\frac{P(B,C)}{P(C)} = P(A|B,C).P(B|C)$
- Luật độc lập:
  - $P(A|B) = P(A)$ nếu A và B độc lập thống kê
  - $P(A,B|C) = P(A|C).P(B|C)$ nếu A và B độc lập có điều kiện C
  - $P(A_1, A_2, \ldots, A_n|C) = P(A_1|C) \ldots P(A_n|C)$ nếu $A_1, A_2, \ldots, A_n$ là độc lập với điều kiện C.

Quy tắc nhân và tổng

- Coi x và y là các biến ngẫu nhiên rời rạc. Miền của chúng lần lượt là X và Y
- **Quy tắc nhân:**

$$P(x, y) = P(x|y)P(y)$$

- **Quy tắc tổng:**

$$P(X) = \sum_{y \in Y} P(x, y)$$

- Tổng sẽ chuyển thành tích phân nếu biến y liên tục

Định lý Bayes

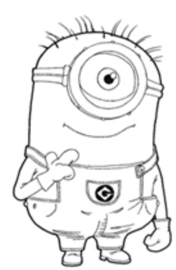
$$P(\theta|D) = \frac{P(D|\theta)P(\theta)}{P(D)}$$

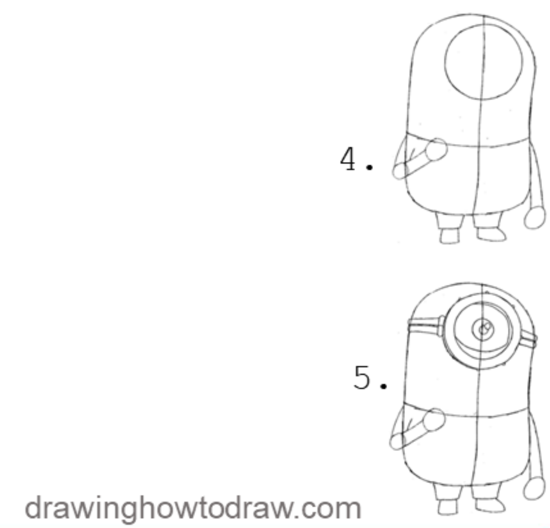
- $P(\theta)$ là xác suất tiên nghiệm (Prior) của biến θ
  - Sự không chắc chắn của chúng ta về θ trước khi quan sát dữ liệu.
- $P(D)$ xác suất tiên nghiệm mà chúng ta có thể quan sát tập dữ liệu D.
- $P(D|\theta)$ xác suất (likelihood) chúng ta có thể quan sát được tập dữ liệu D khi biết trước biến θ
- $P(\theta|D)$ xác suất hậu nghiệm của θ khi đã quan sát được tập dữ liệu D
  - Cách tiếp cận Bayesian dựa trên thông số này.

Mô hình xác suất

Mô hình xác suất

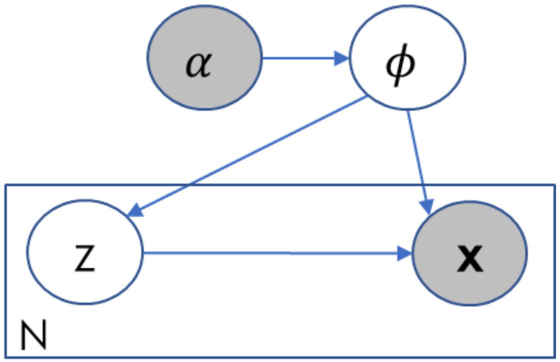
- Giả thuyết của chúng ta về quá trình dữ liệu được sinh ra như thế nào.
- VD: Một câu được tạo ra như thế nào?
  - Chúng ta giả sử bộ não hoạt động theo quy trình sau:
  - Đầu tiên, chọn chủ đề cho câu nói
  - Sinh từng từ một để tạo thành câu
- TIM được tạo ra như thế nào?





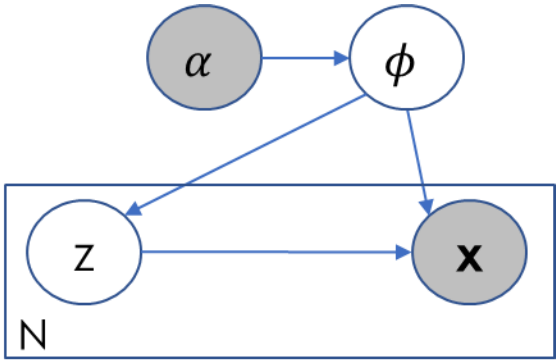
Mô hình xác suất

- Một mô hình đôi khi bao gồm
  - **Biến quan sát được:** mô tả những thứ quan sát hoặc thu thập được (ví dụ: $\boldsymbol{x}$)
  - **Biến ẩn**: mô tả những thứ không quan sát được (ví dụ: z, ϕ)
  - **Biến cục bộ:** liên kết với một quan sát (ví dụ: z, $\boldsymbol{x}$)
  - **Biến toàn cục:** chung cho các dữ liệu và thường dùng để đại diện cho mô hình (ví dụ: ϕ)
  - **Mối quan hệ giữa các biến**
- Mỗi biến tuân theo một phân phối xác suất nào đó.



Các loại mô hình

- **Mô hình đồ thị xác suất (PGM)**
  - Mỗi đỉnh đại diện cho một biến ngẫu nhiên, màu xám biểu diễn biến quan sát được, màu trắng biểu diễn biến ẩn



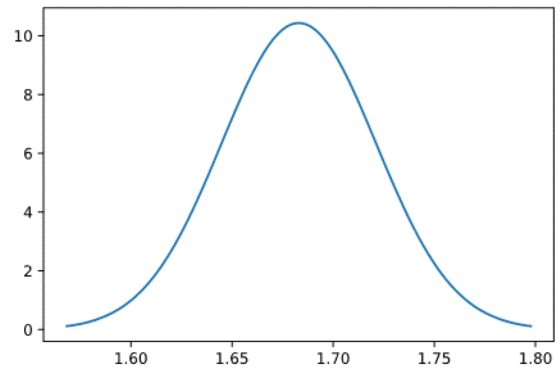
  - Mỗi cạnh đại diện cho mối quan hệ phụ thuộc có điều kiện giữa hai biến
  - Mô hình đồ thị có hướng: mỗi cạnh tuân theo một chiều
  - Mô hình đồ thị vô hướng: không có chiều trên các cạnh.
- **Mô hình biến ẩn**: một PGM có ít nhất 1 biến ẩn
- **Mô hình Bayes**: một PGM có xác suất tiên nghiệm trên các tham số mô hình.

Phân phối chuẩn đơn biến

- Chúng ta muốn mô hình hóa chiều cao của một người
  - Tập dữ liệu từ 10 người ở Hà Nội:

  D = {1.6, 1.7, 1.65, 1.63, 1.75, 1.71, 1.68, 1.72, 1.77, 1.62}
- Gọi x là biến ngẫu nhiên đại diện cho chiều cao của một người
- Ta giả thuyết: x tuân theo phân phối chuẩn (Gaussian) với hàm mật độ xác suất (PDF):

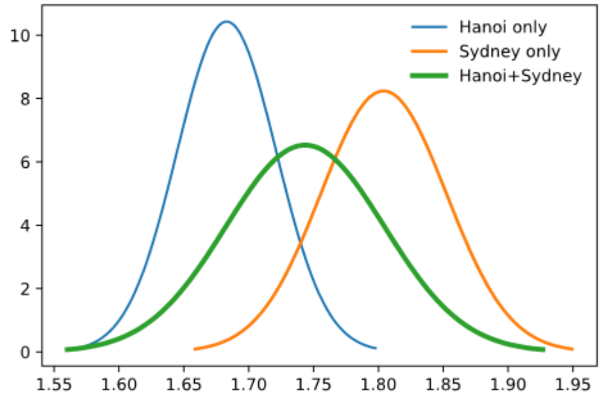
$$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\mu,\sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2}$$



- Trong đó $\{\mu,\sigma^2\}$là giá trị trung bình và phương sai
- Ghi chú:
  - $\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\mu,\sigma^2)$ đại diện cho lớp các phân phối chuẩn
  - Lớp này được tham số hóa bởi $\boldsymbol{\theta} = (\mu,\sigma^2)$
- Quá trình học: chúng ta cần biết các giá trị cụ thể của $\{\mu,\sigma^2\}$

Phân phối chuẩn đơn biến

- Mục tiêu là mô hình hóa chiều cao của một người
- Tập dữ liệu từ 10 người ở Hà Nội + 10 người ở Sydney
  - D = {1.6, 1.7, 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}
- Gọi x là biến ngẫu nhiên đại diện cho chiều cao
- Nếu chúng ta sử dụng phân phối Chuẩn:
  - Đường màu xanh lam mô hình chiều cao ở Hà Nội
  - Đường màu cam mô hình chiều cao ở Sydney
  - Đường màu xanh lục mô hình toàn bộ D



- Gaussian không mô hình hóa tốt cho dữ liệu này

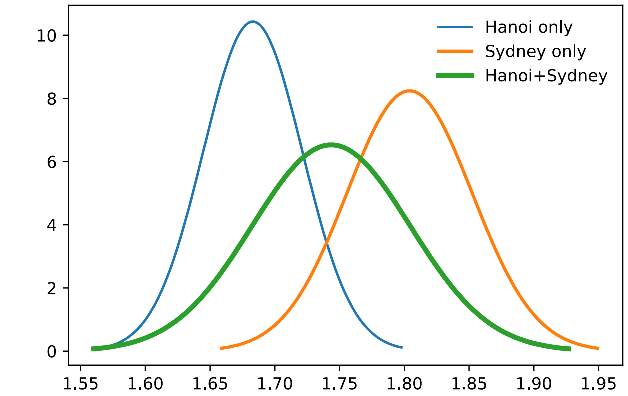
→Mô hình hỗn hợp?

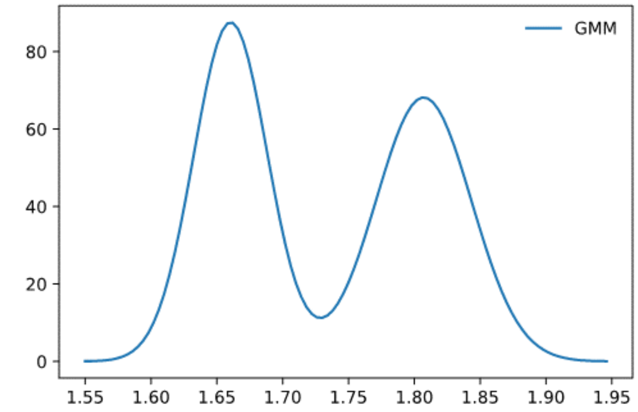
Mô hình Gaussian hỗn hợp đơn biến

- **Giả định:** dữ liệu được tạo từ hai phân bố Gaussian khác nhau và mỗi quan sát được sinh bởi một trong số đó.

  Quá trình sinh:
  - Chọn chỉ số $z \sim Multinomial(z|\phi)$
  - Sinh mẫu $\boldsymbol{x} \sim Normal(\boldsymbol{x} \mid \mu_z, \sigma_z^2)$
- Đây là mô hình hỗn hợp Gauss
  - (μ_1, σ_1^2)đại diện cho phân phối Gaussian thứ nhất
  - (μ_2, σ_2^2) đại diện cho Gaussian thứ hai
  - $\phi \in [0,1]$ là tham số của phân phối Đa thức, và
  - $P(z = 1| \phi) = \phi = 1 - P(z = 2| \phi)$
- Hàm mật độ:

$$\phi \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\mu_1, \sigma_1^2) + (1 - \phi)\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\mu_2, \sigma_2^2)$$





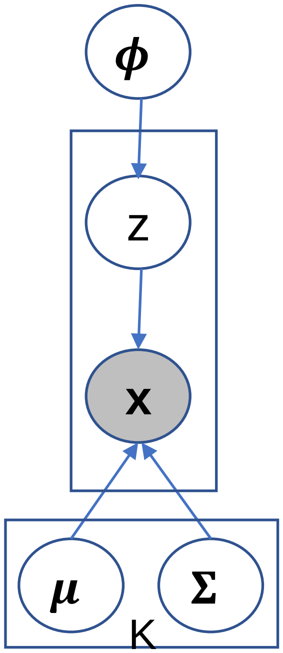
GMM đa biến

- Xét trường hợp mỗi x thuộc không gian n chiều.
- GMM: giả định rằng dữ liệu là các mẫu từ K phân bố Gaussian khác nhau.
- Mỗi x được tạo ra từ một trong K Gaussian theo ***quá trình sinh*** như sau:
  - Lấy chỉ số: $z \sim Multinomial(z|\boldsymbol{\phi})$
  - Sinh: $\boldsymbol{x} \sim Normal(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_z, \boldsymbol{\Sigma}_z)$
- Hàm mật độ:

$$p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi}) = \sum_{k=1}^{K} \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$

  - $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_K)$ chứa trọng số của từng phân bố con
- Mỗi Gaussian có hàm mật độ:

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

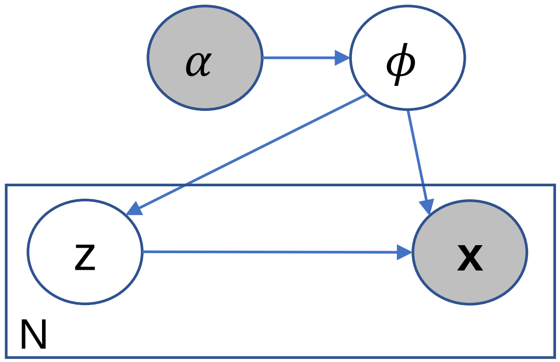


Một số mô hình phổ biến

- Mô hình hỗn hợp Gaussian (GMM)
  - Mô hình dữ liệu có giá trị thực
- Mô hình Latent Dirichlet Allocation
  - Mô hình các chủ đề ẩn trong dữ liệu văn bản
- Mô hình Markov ẩn (HMM)
  - Mô hình chuỗi thời gian, dữ liệu theo thời gian hoặc có bản chất tuần tự
- Trường ngẫu nhiên có điều kiện (CRF)
  - Cho dự đoán cấu trúc
- Mô hình sinh sâu (Deep generative models)
  - Mô hình các cấu trúc ẩn, sinh dữ liệu nhân tạo

Mô hình xác suất: hai bài toán

- **Suy diễn:** cho một trường hợp nhất định $\boldsymbol{x}_n$
  - Khôi phục biến cục bộ (ví dụ: z_n)
  - Sự phân phối của các biến cục bộ (VD: $P(z_n, \boldsymbol{x}_n|\phi)$)
  - Ví dụ: đối với GMM, ta muốn biết z_n đại diện cho phân bố con nào đã tạo ra $\boldsymbol{x}_n$



- **Học (ước lượng):**
  Cho trước một tập dữ liệu, hãy ước lượng phân phối đồng thời của các biến
  - Ví dụ: ước lượng $P(\phi, z_1, \dots, z_n, \boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n|\alpha)$
  - Ví dụ: ước lượng $P(\boldsymbol{x}_1, \dots, \boldsymbol{x}_n|\alpha)$
  - Ví dụ: ước lượng α
  - Suy diễn của các biến cục bộ thường là cần thiết

Suy diễn và học

Một số cách suy diễn

- Gọi D là dữ liệu và h là giả thuyết
  - Giả thuyết: tham số chưa biết, biến ẩn,…
- **Cực đại hóa khả năng** (Maximum Likelihood Estimation - MLE)

$$h^* = \arg\max_{h \in \boldsymbol{H}} P(D|h)$$

  - Tìm h^* (trong không gian giả thuyết H) tối đa hóa khả năng xảy ra của dữ liệu.
  - Nói cách khác: MLE đưa ra suy luận về mô hình có nhiều khả năng đã tạo ra dữ liệu.
- Suy diễn Bayes (Bayesian inference) xem xét việc biến đổi tri thức tiên nghiệm $P(h)$ của chúng ta, thông qua dữ liệu D, thành tri thức hậu nghiệm $P(h|D)$
- Từ luật Bayes: $P(h|D) = P(D|h)P(h)/P(D)$

$$P(h|D) \propto P(D|h) * P(h)$$

(Posterior ∝ Likelihood * Prior)

Một số cách suy diễn (2)

- Trong một số trường hợp, chúng ta có thể biết phân phối tiên nghiệm của h.
- **Cực đại hóa hậu nghiệm** (Maximum a Posterior Estimation - MAP)

$$h^* = \arg\max_{h \in \mathbf{H}} P(h|\mathbf{D}) = \arg\max_{h \in \mathbf{H}} P(\mathbf{D}|h)\, P(h)/P(\mathbf{D})$$

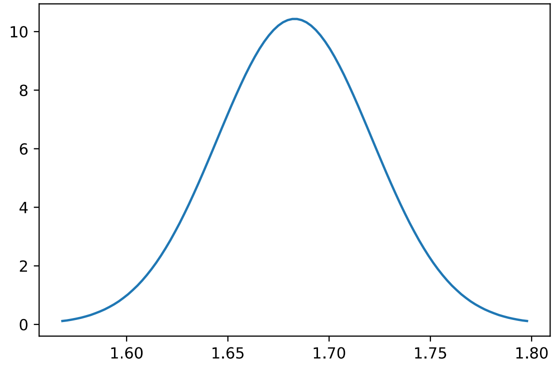
$$= \arg\max_{h \in \mathbf{H}} P(\mathbf{D}|h)\, P(h)$$

  - Tìm h^* tối đa hóa xác suất hậu nghiệm của h.
  - MAP tìm một điểm, không phải phân phối → ước lượng điểm
- MLE là một trường hợp đặc biệt của MAP, khi sử dụng phân phối đều cho h.
- Suy diễn Bayes đầy đủ cố gắng ước lượng phân phối hậu nghiệm đầy đủ $P(h|D)$, không chỉ một điểm h*.
- Ghi chú: MLE, MAP hoặc Bayes đầy đủ có thể được áp dụng cho cả quá trình học và suy diễn.

MLE: ví dụ Gaussian

- Chúng ta muốn mô hình hóa chiều cao của một người bằng tập dữ liệu
  D = {1.6, 1.7, 1.65, 1.63, 1.75, 1.71, 1.68, 1.72, 1.77, 1.62}
- Gọi x là biến ngẫu nhiên đại diện cho chiều cao của một người.
- Mô hình: giả sử rằng x tuân theo phân phối Gaussian với giá trị trung bình μ và phương sai σ^2
- **Quá trình học:** tìm (μ, σ) từ dữ liệu đã cho $\boldsymbol{D} = \{\boldsymbol{x}_1, \ldots, \boldsymbol{x}_{10}\}$.
- Gọi $f(\boldsymbol{x}|\mu,\sigma)$ là hàm mật độ của họ Gaussian, được tham số hóa bởi (μ,σ).
  - $f(\boldsymbol{x}_n|\mu,\sigma)$ là khả năng xảy ra của trường hợp $\boldsymbol{x}_n$
  - $f(\boldsymbol{D}|\mu,\sigma)$ là hàm khả năng xảy ra của D.
- Sử dụng MLE, chúng ta đi tìm

$$(\mu_*, \sigma_*) = \arg\max_{\mu,\sigma} f(\boldsymbol{D}|\mu, \sigma)$$



MLE: ví dụ Gaussian (2)

- Giả thuyết i.i.d.: giả định rằng dữ liệu được sinh ra một cách độc lập với nhau
- Khi đó $P(\boldsymbol{D}|\mu,\sigma) = P(x_1,\ldots,x_{10}|\mu,\sigma) = \prod_{i=1}^{10} P(x_i|\mu,\sigma)$
- Sử dụng giả thuyết này, MLE sẽ tìm

$$(\mu_*,\sigma_*) = \arg\max_{\mu,\sigma} \prod_{i=1}^{10} f(x_i|\mu,\sigma) = \arg\max_{\mu,\sigma} \prod_{i=1}^{10} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu)^2}$$

$$= \arg\max_{\mu,\sigma} \log \prod_{i=1}^{10} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu)^2}$$

Log trick, $\log \stackrel{\text{def}}{=} \ln$

$$= \arg\max_{\mu,\sigma} \sum_{i=1}^{10} \left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x_i-\mu)^2 - \log\sqrt{2\pi\sigma^2} \right)$$

- Sử dụng đạo hàm (cho biến μ, σ), ta sẽ tìm được

$$\mu_* = \frac{1}{10}\sum_{i=1}^{10} x_i = 1.683, \qquad \sigma_*^2 = \frac{1}{10}\sum_{i=1}^{10} (x_i-\mu_*)^2 \approx 0.0015$$

MAP: Gaussian naïve Bayes

- Xét bài toán phân lớp
  - Dữ liệu huấn luyện **D** = {($\mathbf{x}_1$, y_1), ($\mathbf{x}_2$, y_2), …, ($\mathbf{x}_M$, y_M)} với M quan sát, C lớp.
  - Mỗi $\mathbf{x}_i$ là một vectơ trong không gian n chiều $\mathbb{R}^n$, $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in})^T$
- *Mô hình:* giả sử có C phân bố khác nhau tạo ra dữ liệu trong D và dữ liệu có nhãn c được tạo ra từ phân phối Gaussian được tham số hóa bởi $(\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c)$
  - $\boldsymbol{\mu}_c$ là vectơ trung bình, $\boldsymbol{\Sigma}_c$ là ma trận hiệp phương sai kích thước $n \times n$.
- *Quá trình học:* ta xét $P(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, c|\boldsymbol{D})$, với $(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = (\boldsymbol{\mu}_1, \boldsymbol{\Sigma}_1, \ldots, \boldsymbol{\mu}_C, \boldsymbol{\Sigma}_C)$

$$(\boldsymbol{\mu}_*, \boldsymbol{\Sigma}_*) \stackrel{\text{def}}{=} \arg\max_{\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, c} P(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, c|\boldsymbol{D}) = \arg\max_{\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, c} P(\boldsymbol{D}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, c)$$

Định lý Bayes,
bỏ P(**D**),
giả thuyết phân bố
tiên nghiệm đều
cho $\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}$

  - Ước lượng P(c) là tỷ lệ của lớp c trong D:
    $P(c) = |\boldsymbol{D}_c|/|\boldsymbol{D}|$ trong đó $\boldsymbol{D}_c$ chứa tất cả các dữ liệu có nhãn c trong D.
  - Vì các lớp C là độc lập, chúng ta có thể học cho mỗi lớp

$$(\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}) \stackrel{\text{def}}{=} \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} P(\boldsymbol{D}_c|\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c) P(c) = \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} P(\boldsymbol{D}_c|\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c)$$

MAP: Gaussian Naïve Bayes (2)

- Giả sử các mẫu là độc lập, ta có:

$$(\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}) = \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} \prod_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} P(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c) = \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} \log P(\boldsymbol{x} | \boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c)$$

$$= \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} \log \left[\frac{1}{\sqrt{\det(2\pi \boldsymbol{\Sigma}_c)}} \exp\left(-\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c)^T \boldsymbol{\Sigma}_c^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c) \right) \right]$$

$$= \arg\max_{\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} -\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c)^T \boldsymbol{\Sigma}_c^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_c) - \log \sqrt{\det(2\pi \boldsymbol{\Sigma}_c)}$$

- Sử dụng gradient theo $\boldsymbol{\mu}_c, \boldsymbol{\Sigma}_c$, chúng ta đạt được:

$$\boldsymbol{\mu}_{c*} = \frac{1}{|\boldsymbol{D}_c|} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} \boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{\Sigma}_{c*} = \frac{1}{|\boldsymbol{D}_c|} \sum_{\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}_c} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_{c*})(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu}_{c*})^T$$

- Do đó sau quá trình huấn luyện chúng ta đạt được $(\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}, P(c))$ cho mỗi lớp c

MAP: Gaussian Naïve Bayes (3)

- Mô hình được huấn luyện: $(\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}, P(c))$ cho mỗi lớp c
- **Dự đoán** cho dữ liệu mới z bằng cách tìm nhãn lớp mà có xác suất hậu nghiệm cao nhất:

Bayes' rule

$$c_z = \arg\max_{c\in\{1,\dots,C\}} P(c|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}) = \arg\max_{c\in\{1,\dots,C\}} P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}, c)P(c)$$

$$= \arg\max_{c\in\{1,\dots,C\}} \log P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\mu}_{c*}, \boldsymbol{\Sigma}_{c*}, c) + \log P(c)$$

$$= \arg\max_{c\in\{1,\dots,C\}} -\frac{1}{2}(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{\mu}_{c*})^T \boldsymbol{\Sigma}_{c*}^{-1}(\boldsymbol{z} - \boldsymbol{\mu}_{c*}) - \log\sqrt{\det(2\pi\boldsymbol{\Sigma}_{c*})} + \log P(c)$$

- Nếu sử dụng MLE, chúng ta không cần sử dụng xác xuất tiên nghiệm P(c)

MAP: Multinomial Naïve Bayes (1)

- Xét bài toán phân loại văn bản (dữ liệu có tính rời rạc)
  - Tập huấn luyện **D** = {($\mathbf{x}_1$, y_1), ($\mathbf{x}_2$, y_2), …, ($\mathbf{x}_M$, y_M)} với M tài liệu, C lớp.
  - TF: mỗi tài liệu $\mathbf{x}_i$ được biểu diễn bằng một vectơ có V chiều, ví dụ: $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{in})^T$ mỗi $\mathbf{x}_i$ là tần suất của từ j trong tài liệu $\mathbf{x}_i$
- *Mô hình:* giả sử có C phân bố khác nhau tạo ra dữ liệu trong D và dữ liệu có nhãn c được tạo ra từ một phân phối đa thức được tham số hóa bởi $\boldsymbol{\theta}_c$ và có hàm khối lượng xác suất

$$f(x_1, \ldots, x_V | \theta_{c1}, \ldots, \theta_{cV}) = \frac{\Gamma(\sum_{j=1}^{V} x_j + 1)}{\prod_{j=1}^{V} \Gamma(x_j + 1)} \prod_{k=1}^{V} \theta_{ck}^{x_k}$$

  - $\theta_{cj} = P(x = j | \theta_{cj})$ là xác suất mà từ $j \in \{1, \ldots, V\}$ xuất hiện, thỏa mãn $\sum_{k=1}^{V} \theta_{ck} = 1$ và Γ là hàm gamma.
- *Quá trình học:* chúng ta có thể làm tương tự với Gaussian Naïve Bayes để ước lượng $\boldsymbol{\theta}_c = (\theta_{c1}, \ldots, \theta_{cV})$ và P(c).

MAP: Multinomial Naïve Bayes (2)

- Mô hình đã huấn luyện: $(\boldsymbol{\theta}_{c*}, P(c))$ cho mỗi lớp c
- Dự đoán cho dữ liệu mới $\boldsymbol{z} = (z_1, \dots, z_V)^T$:

$$c_z = \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} P(c|\boldsymbol{z}, \boldsymbol{\theta}_{c*}) = \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}_{c*}, c) P(c)$$

$$= \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} \log P(\boldsymbol{z}|\boldsymbol{\theta}_{c*}) + \log P(c) \quad \text{(MNB.1)}$$

$$= \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} \log \frac{\Gamma(\sum_{j=1}^{V} z_j + 1)}{\prod_{j=1}^{V} \Gamma(z_j + 1)} \prod_{k=1}^{V} \theta_{ck*}^{z_k} + \log P(c)$$

$$= \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} \log \prod_{k=1}^{V} \theta_{ck*}^{z_k} + \log P(c)$$

$$= \arg \max_{c \in \{1,\dots,C\}} \log \prod_{k=1}^{V} P(z_k|\theta_{ck*}) + \log P(c) \quad \text{(MNB.2)}$$

  - Nhãn cho xác suất hậu nghiệm cao nhất

- Lưu ý: về cơ bản chúng ta giả thuyết rằng *các thuộc tính là độc lập với nhau* (từ hai phương trình MNB.1 và MNB.2)

Nhìn lại GMM

- Xem xét việc học GMM, với phân phối K Gaussian, từ dữ liệu huấn luyện **D** = {**x**$_1$, **x**$_2$, …, **x**$_M$}.
- Hàm mật độ là $p(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi}) = \sum_{k=1}^{K} \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$
  - $\boldsymbol{\phi} = (\phi_1, \dots, \phi_K)$ đại diện cho trọng số của các Gaussian
  - Mỗi Gaussian đa biến có mật độ:
    $$\mathcal{N}(\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k) = \frac{1}{\sqrt{\det(2\pi\boldsymbol{\Sigma}_k)}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_k)^T \boldsymbol{\Sigma}_k^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_k)\right]$$
- MLE cố gắng cực đại hóa hàm log-likelihood:
$$L(\boldsymbol{\mu},\boldsymbol{\Sigma},\boldsymbol{\phi}) = \sum_{i=1}^{M} \log \sum_{k=1}^{K} \phi_k \mathcal{N}(\boldsymbol{x}_i \mid \boldsymbol{\mu}_k, \boldsymbol{\Sigma}_k)$$
- Chúng ta không thể tìm thấy một nghiệm có công thức tường minh!
  - Cần các thuật toán xấp xỉ.

Vài tình huống khó khăn

- Không tìm được ngay công thức nghiệm:
  - Các ví dụ trước đây đều là các ví dụ đơn giản bởi vì có thể tìm được lời giải ngay bằng gradient
  - Nhiều mô hình G khác không có dạng công thức nghiệm cụ thể như vậy
- Không có công thức tường minh để tình toán
- Bài toán suy diễn không khả thi:
  - Inference in many probabilistic models is NP-hard.
    [Sontag & Roy, 2011; Tosh & Dasgupta, 2019]

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.
- Gal, Yarin, and Zoubin Ghahramani. "Dropout as a bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning." In International Conference on Machine Learning, 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 Proceedings of the 32nd Conference on Learning Theory, in PMLR 99:2993-3035, 2019.
- Sontag, David, and Daniel Roy, "Complexity of inference in latent dirichlet allocation" in: Proceedings of Advances in Neural Information Processing System, 2011.

VIỆN CÔNG NGHỆ THÔNG TIN VÀ TRUYỀN THÔNG
SCHOOL OF INFORMATION AND COMMUNICATION TECHNOLOGY

Thank you for your attentions !