Học Máy

(Machine Learning)

Thân Quang Khoát

khoattq@soict.hust.edu.vn

Viện Công nghệ thông tin và Truyền thông

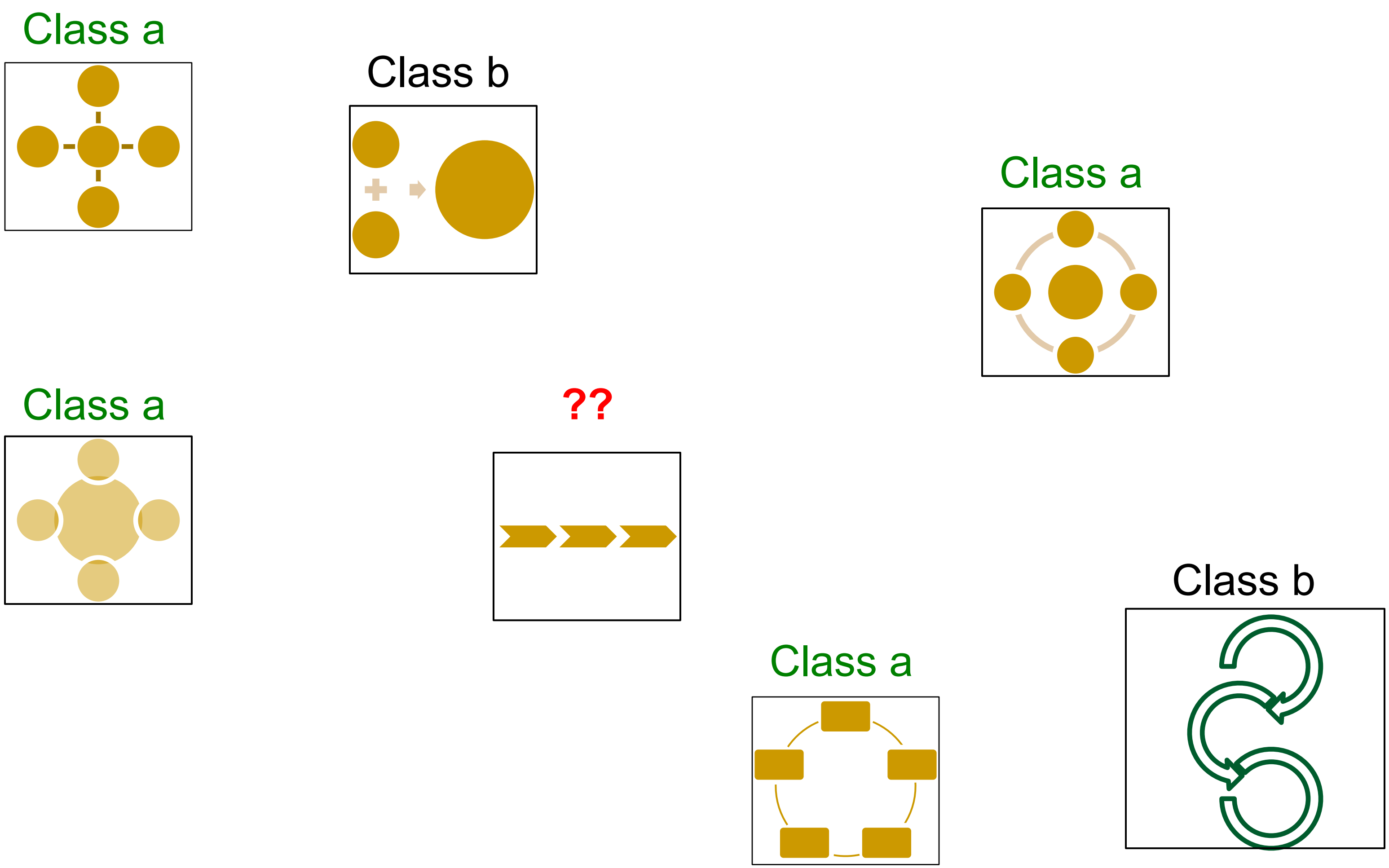
Trường Đại Học Bách Khoa Hà Nội

Năm 2017

Nội dung môn học:

- Giới thiệu chung
- Các phương pháp học không giám sát
- **Các phương pháp học có giám sát**
  - **Học dựa trên các láng giềng gần nhất (Nearest neighbors learning)**
- Đánh giá hiệu năng hệ thống học máy

Các bạn phân loại thế nào?



Học dựa trên các láng giềng gần nhất

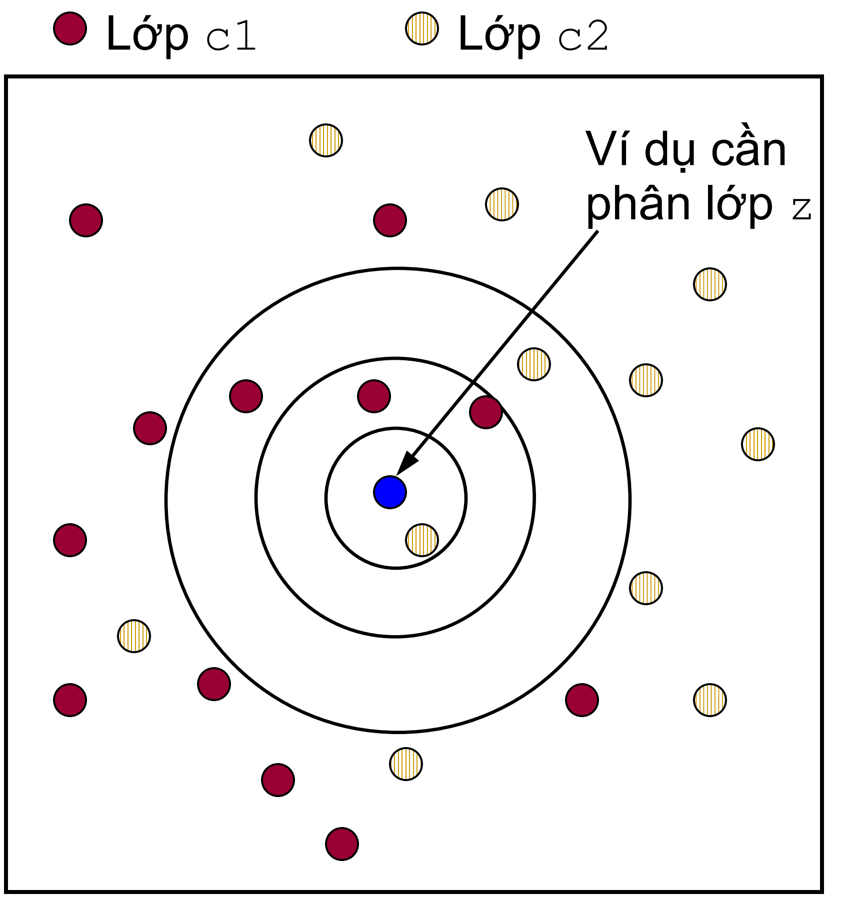
- ***K-nearest neighbors*** (k-NN) là một trong số các phương pháp phổ biến trong học máy. Vài tên gọi khác như:
  - Instance-based learning
  - Lazy learning
  - Memory-based learning
- Ý tưởng của phương pháp
  - Không xây dựng một mô hình (mô tả) rõ ràng cho hàm mục tiêu cần học.
  - Quá trình học chỉ lưu lại các dữ liệu huấn luyện.
  - Việc dự đoán cho một quan sát mới sẽ dựa vào các hàng xóm gần nhất trong tập học.
- Do đó k-NN là một phương pháp phi tham số (nonparametric methods)

k-NN

- Hai thành phần chính:
  - Độ đo tương đồng (similarity measure/distance) giữa các đối tượng.
  - Các hang xóm sẽ dùng vào việc phán đoán.
- *Trong một số điều kiện thì k-NN có thể đạt mức lỗi tối ưu Bayes* (mức lỗi tối ưu của bất kỳ phương pháp nào) [Gyuader and Hengartner, JMLR 2013]
  - Thậm chí khi chỉ dùng 1 hàng xóm gần nhất thì nó cũng có thể đạt đến mức lỗi tối ưu Bayes. [Kontorovich & Weiss, AISTATS 2015]

Ví dụ: bài toán phân lớp

- Xét 1 láng giềng gần nhất
  - → Gán `z` vào lớp `c2`
- Xét 3 láng giềng gần nhất
  - → Gán `z` vào lớp `c1`
- Xét 5 láng giềng gần nhất
  - → Gán `z` vào lớp `c1`



Giải thuật k-NN cho phân lớp

- Mỗi ví dụ học $\boldsymbol{x}$ được biểu diễn bởi 2 thành phần:
  - Mô tả của ví dụ: $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$, trong đó $x_i \in R$
  - 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: $\boldsymbol{D}$
- Giai đoạn phân lớp: Để phân lớp cho một ví dụ (mới) $\boldsymbol{z}$
  - Với mỗi ví dụ học $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{D}$, tính khoảng cách giữa $\boldsymbol{x}$ và $\boldsymbol{z}$
  - Xác định tập $NB(\boldsymbol{z})$ – các láng giềng gần nhất của $\boldsymbol{z}$

    → Gồm $\boldsymbol{k}$ ví dụ học trong $\boldsymbol{D}$ gần nhất với $\boldsymbol{z}$ tính theo một hàm khoảng cách d
  - Phân $\boldsymbol{z}$ vào lớp chiếm số đông (the majority class) trong số các lớp của các ví dụ trong $NB(\boldsymbol{z})$

Giải thuật k-NN cho hồi quy

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

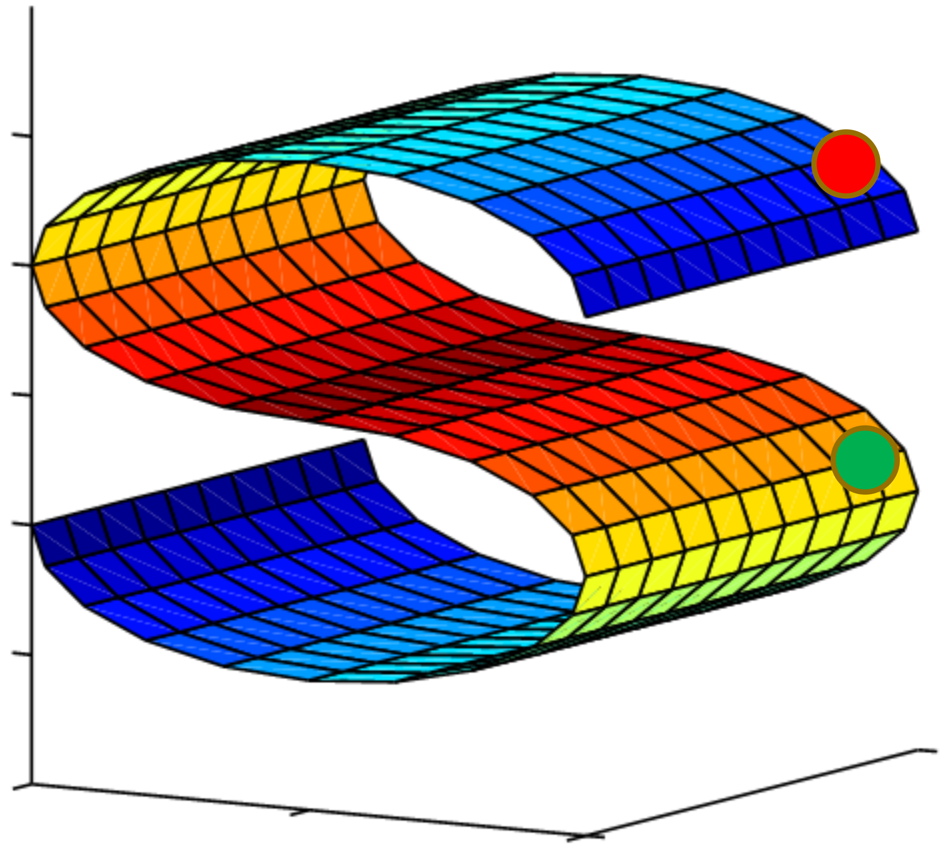
    → Gồm $\boldsymbol{k}$ ví dụ học trong $\boldsymbol{D}$ gần nhất với $\boldsymbol{z}$ tính theo một hàm khoảng cách d
  - Dự đoán giá trị đầu ra đối với $\boldsymbol{z}$: $y_z = \frac{1}{k}\sum_{\boldsymbol{x} \in NB(\boldsymbol{z})} y_x$

k-NN: Các vấn đề cốt lõi

Suy
nghĩ
khác
nhau
!

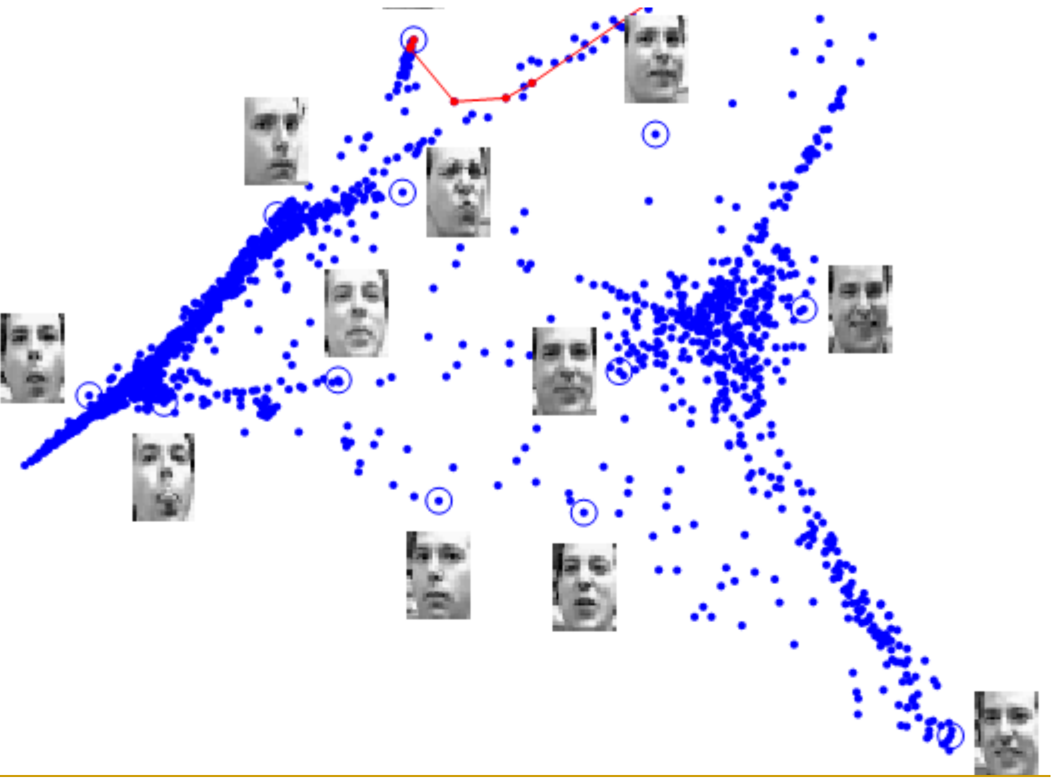
k-NN: Các vấn đề cốt lõi

- Hàm khoảng cách
  - Mỗi hàm sẽ tương ứng với một cách nhìn về dữ liệu.
  - Vô hạn hàm!!!
  - Chọn hàm nào?



k-NN: Các vấn đề cốt lõi

- Chọn tập láng giềng $NB(\boldsymbol{z})$
  - Chọn bao nhiêu láng giềng?
  - Giới hạn chọn theo vùng?



k-NN: một hay nhiều láng giềng?

- *Về lý thuyết thì 1-NN cũng có thể là một trong số các phương pháp tối ưu.*
- k-NN là một phương pháp tối ưu Bayes nếu gặp một số điều kiện, chẳng hạn: y bị chặn, cỡ M của tập học lớn, hàm hồi quy liên tục, và

$$k \to \infty, (k/M) \to 0, (k/\log M) \to +\infty$$

- Trong thực tiễn ta nên lấy nhiều hàng xóm $(k > 1)$ khi cần phân lớp/dự đoán, nhưng không quá nhiều. Lý do:
  - Tránh ảnh hưởng của lỗi/nhiễu nếu chỉ dùng 1 hàng xóm.
  - Nếu quá nhiều hàng xóm thì sẽ phá vỡ cấu trúc tiềm ẩn trong dữ liệu.

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

Hàm tính khoảng cách (3)

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

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

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

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)
  - $\boldsymbol{x}$ = (`Age`=20, `Income`=12000, `Height`=1.68)
  - $\boldsymbol{z}$ = (`Age`=40, `Income`=1300, `Height`=1.75)
- Khoảng cách giữa $\boldsymbol{x}$ và $\boldsymbol{z}$
  - $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}) = [(20-40)^2 + (12000-1300)^2 + (1.68-1.75)^2]^{0.5}$
  - 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`

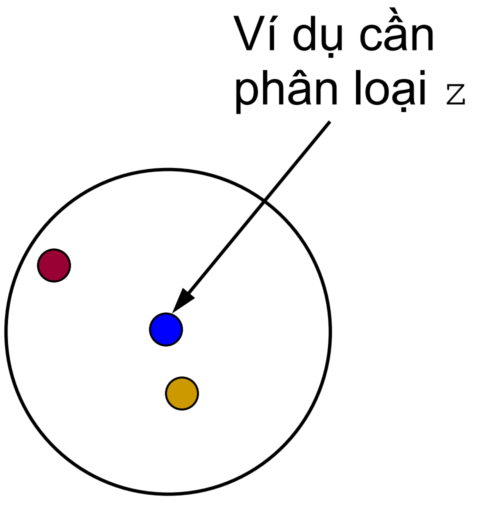
  → Vì: Thuộc tính `Income` có miền giá trị rất lớn so với các thuộc tính khác
- Cần phải chuẩn hóa miền giá trị (đưa về cùng một khoảng giá trị)
  - Khoảng giá trị [0,1] thường được sử dụng
  - Đối với mỗi thuộc tính `i`: $x_i := x_i / \max(x_j)$

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
  - w_i là trọng số của thuộc tính `i`: $$d(x,z)=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}w_i(x_i-z_i)^2}$$
- 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 $NB(\boldsymbol{z})$ – gồm k ví dụ học gần nhất với ví dụ cần phân lớp/dự đoán $\boldsymbol{z}$
  - Mỗi ví dụ (láng giềng gần nhất) này có khoảng cách khác nhau đến $\boldsymbol{z}$
  - Các láng giềng này có ảnh hưởng như nhau đối với việc phân lớp/dự đoán cho $\boldsymbol{z}$? → KHÔNG!
- Nên gán các mức độ ảnh hưởng (đóng góp) của mỗi láng giềng gần nhất tùy theo khoảng cách của nó đến $\boldsymbol{z}$
  - 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 $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$ – khoảng cách giữa $\boldsymbol{x}$ và $\boldsymbol{z}$
  - $v(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$ tỷ lệ nghịch với $d(\boldsymbol{x},\boldsymbol{z})$
- Đối với bài toán phân lớp: $c(z) = \arg\max_{c_j \in C} \sum_{x \in NB(z)} v(x,z).Identical(c_j, c(x))$

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

- Đối với bài toán dự đoán (hồi quy): $f(z) = \dfrac{\sum_{x \in NB(z)} v(x,z).f(x)}{\sum_{x \in NB(z)} v(x,z)}$
- Lựa chọn một hàm xác định trọng số theo khoảng cách:

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

k-NN: Ưu nhược điểm

- 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 c bộ phân loại cho c lớp
  - Về mặt lý thuyết thì k-NN có thể đạt khả năng phán đoán tối ưu khi gặp một số điều kiện.
  - Rất Linh động trong việc chọn hàm khoảng cách.
    - → Có thể dùng độ tương tự (similarity): cosine
    - → Có thể dùng độ đo khác, chẳng hạn Kullback-Leibler divergence, Bregman divergence, …
- Các nhược điểm
  - 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

Tài liệu tham khảo

- A. Kontorovich and Weiss. A Bayes consistent 1-NN classifier. *Proceedings of the 18th International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS). JMLR: W&CP volume 38*, 2015.
- A. Guyader, N. Hengartner. On the Mutual Nearest Neighbors Estimate in Regression. *Journal of Machine Learning Research* 14 (2013) 2361-2376.
- L. Gottlieb, A. Kontorovich, and P. Nisnevitch. Near-optimal sample compression for nearest neighbors. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2014.

k-NN: bài tập

- K-NN khác gì so với phương pháp Least squares?