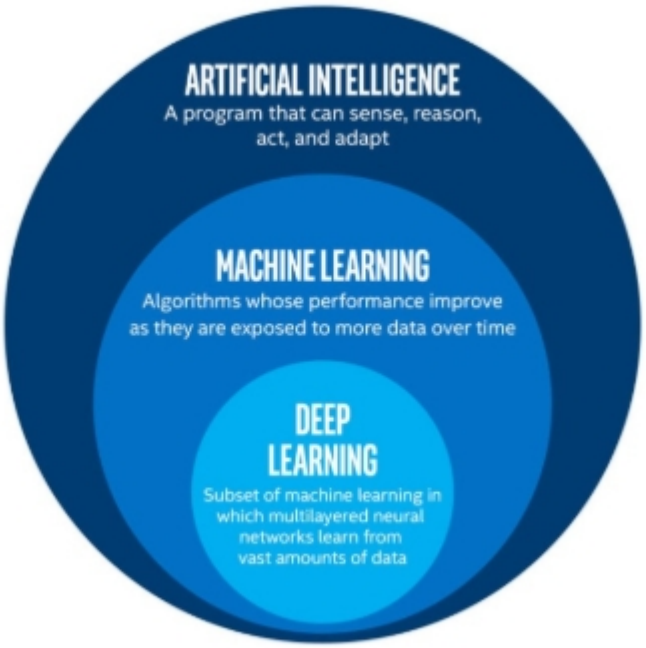
#AI/MachineLearning #HCMUS

Thông tin kỳ thi

Thời gian: 15g40 - 01/07/2024
Phòng thi: E402 (NVC)

Lecture 0: Introduce to Machine Learning

#AI
#AI/MachineLearning
#AI/MachineLearning/DeepLearning
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning
#AI/MachineLearning/UnsupervisedLearning
#AI/MachineLearning/ReinforcementLearning

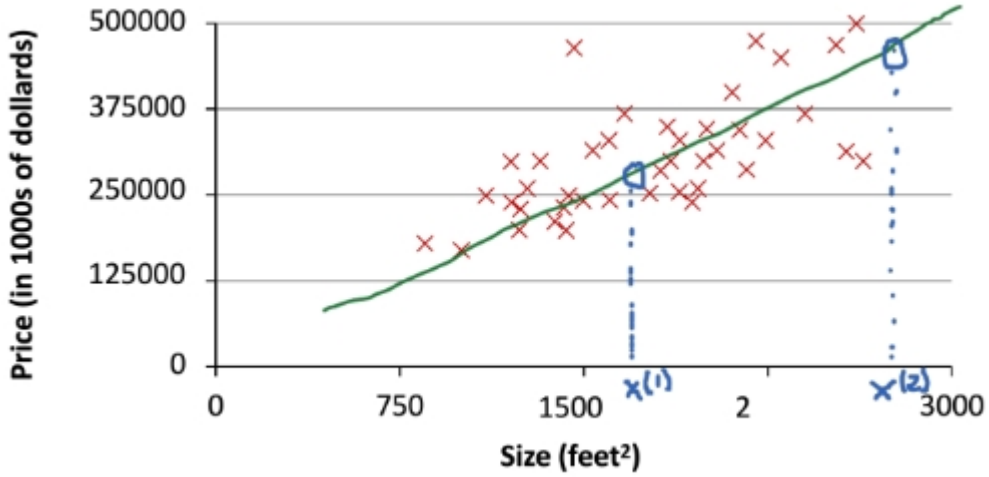


Types of ML (Machine Learning):

1. Supervised learning: have labeled examples of the correct behavior. Dữ liệu có gán nhãn đúng với những gì nó thể hiện
2. Unsupervised learning: no labeled examples - instead, looking for interesting patterns in the data. Ngược lại với Supervised learning, data ko gán nhãn. Do đó, các bài toán liên quan đến Unsupervised là đi tìm các pattern ẩn bên trong data
3. Reinforcement learning: learning system receives a reward signal, tries to learn to maximize the reward signal. Là hệ thống máy học mà nó sẽ học dựa trên các tín hiệu hoặc dữ liệu trong quá trình thực hiện. Ví dụ như huấn luyện bot chơi game,...

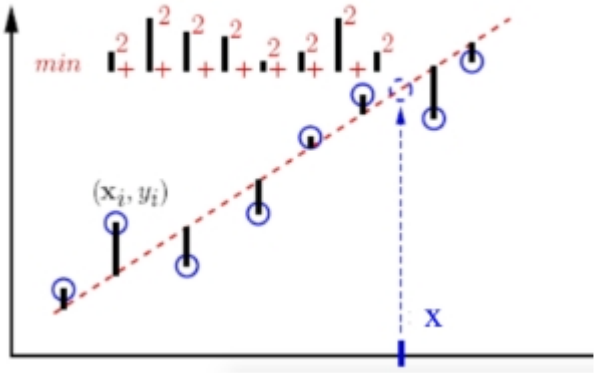
Lecture 1: Linear Regression

#AI/MachineLearning/Regression
#AI/MachineLearning/Regularization
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning
#DataMining/DataPreprocessing/Normalization



$$y = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_d x_d = \sum_{j=0}^{d} \theta_j x_j$$

Fit model by minimizing sum of squared errors



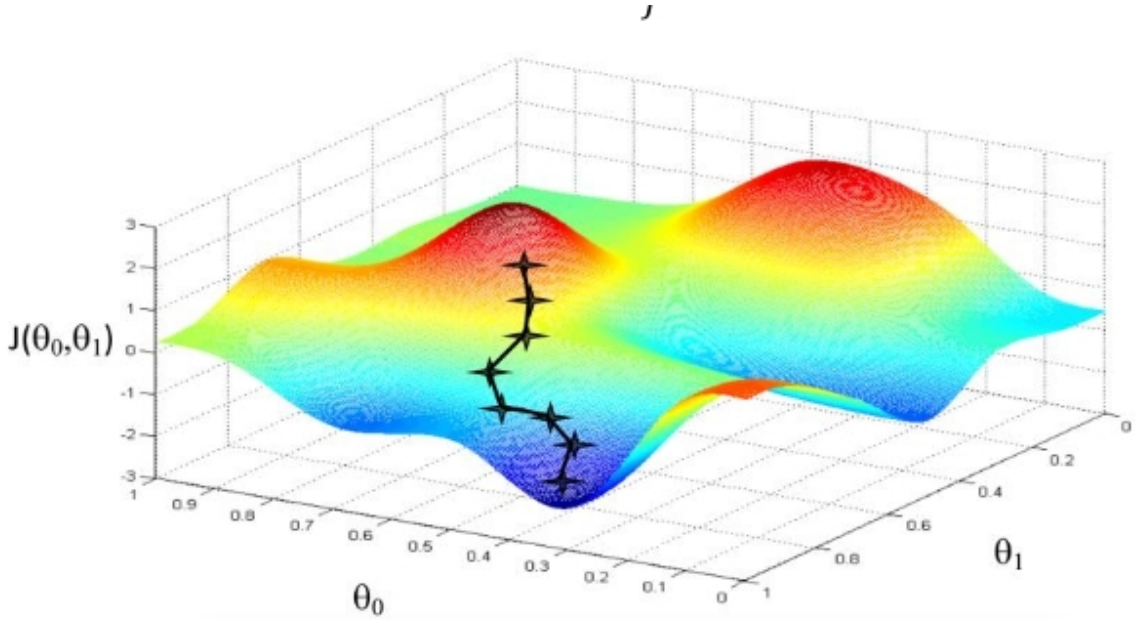
Cost Function:

$$J(\theta) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2$$

Gradient descent

1. Choose initial value for θ
2. Until we reach the minimum, update θ to reduce $J(\theta)$

$$\theta_j = \theta_j - \alpha(\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta))$$



α được gọi là *learning rate* và thường giá trị của nó nhỏ. Đây là một trong những *hyperparameter* phổ biến nhất.

Gradient Descent Variants

Có 3 loại là:

1. Batch gradient descent

Thuật toán sẽ tính toán dựa vào toàn bộ dataset ban đầu. GD (Gradient descent) chỉ cập nhật đúng một lần.

Thuật toán sẽ hội tụ đến global minimum (với hàm lồi) và local minimum (với hàm ko lồi) một cách nhanh nhất nhưng nó ko phù hợp với các hệ thống máy tính nếu đầu vào dữ liệu lớn (lớn hơn RAM hiện có)

2. Stochastic gradient descent (SGD)

Thuật toán sẽ update với từng data sample, hay nói cách khác là lần lượt một data sample sẽ được đưa vào thuật toán **(Note: phải shuffle data)**.

Ưu điểm là thuật toán sẽ chạy nhanh hơn Batch GD. Phù hợp với online learning (là quá trình học cập nhật từ từ trong ML, mô hình sẽ

phải phản ứng và học tập liên tục với từng dữ liệu mới)

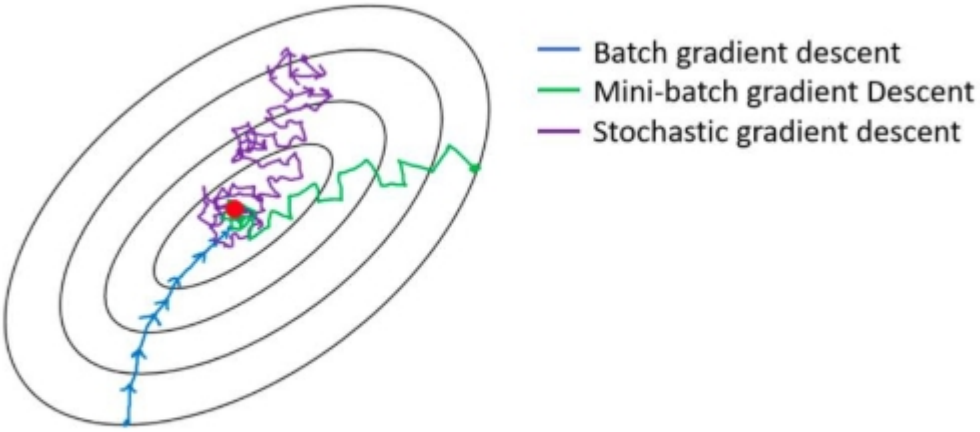
Nhược điểm là việc tiến về cực tiểu sẽ khó khăn hơn giá trị của hàm loss function sẽ bị tăng giảm một cách liên tục khó kiểm soát (high variance)

3. Mini-batch gradient descent

Đây là thuật toán "nằm ở giữa" hai thuật toán trên. Dữ liệu đưa vào thụât toán sẽ là k data sample

Ưu điểm: giảm variance

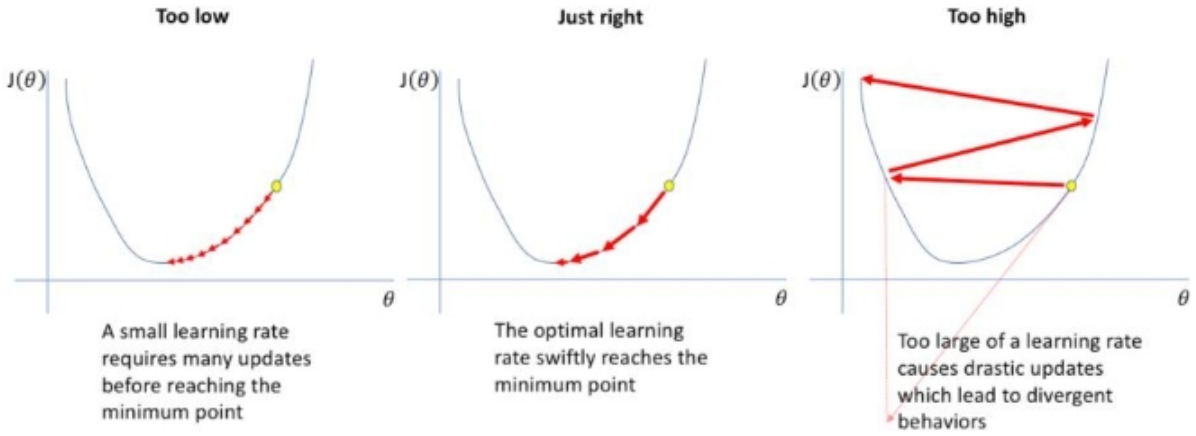
Về giá trị k, chúng ta sẽ set tùy thuộc vào RAM của máy tính (thường là từ 32 đến 256)



Gradient descent variants' trajectory towards minimum

Method	Accuracy	Time	Memory Usage	Online Learning
Batch gradient descent	○	Slow	High	×
Stochastic gradient descent	△	High	Low	○
Mini-batch gradient descent	○	Medium	Medium	○

Choosing Learning Rate



1. LR (learning rate) with Exponential Decay

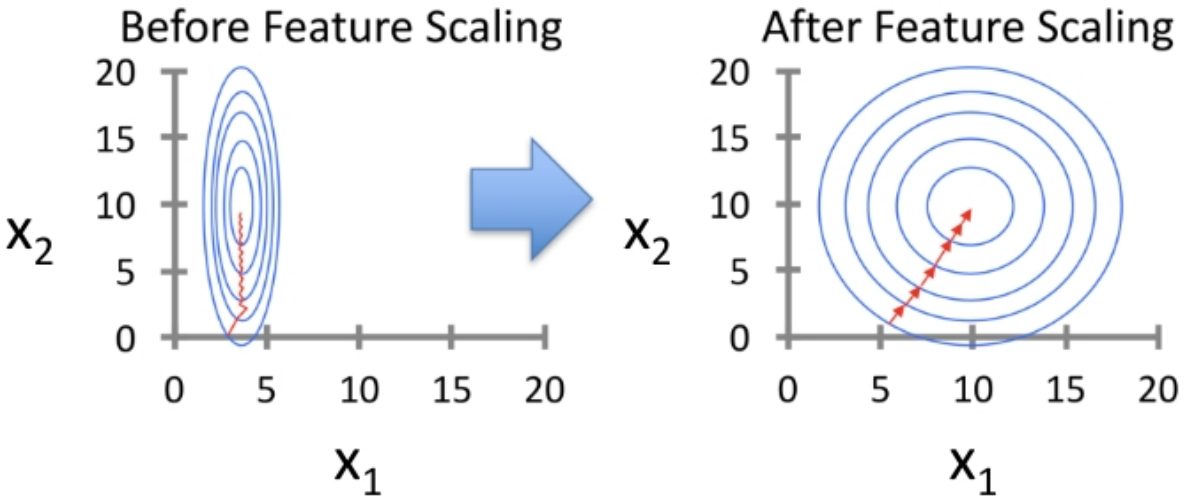
$$\mathrm{LR} = \mathrm{LR} * \exp(-\mathrm{decayRate} \times \mathrm{epochNum})$$

2. Step Decay

$$\mathrm{LR} = \mathrm{LR} * \mathrm{dropRate}^{\frac{\mathrm{epoch}}{\mathrm{stepSize}}}$$

Improved Learning

1. Feature Scaling



1.1. Standardization

Replace each value with:

$$x_j^{(i)} := \frac{x_j^{(i)} - \mu_j}{s_j}$$

Với $\mu_j = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_j^{(i)}$ và $s_j = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} |x_j^{(i)} - \mu_j|}{n}}$

1.2. Min-max scaling

$$x := \frac{x - min(x)}{max(x) - min(x)}$$

Trả ra x thuộc $[0, 1]$

1.3. Mean scaling

$$x := \frac{x - mean(x)}{max(x) - min(x)}$$

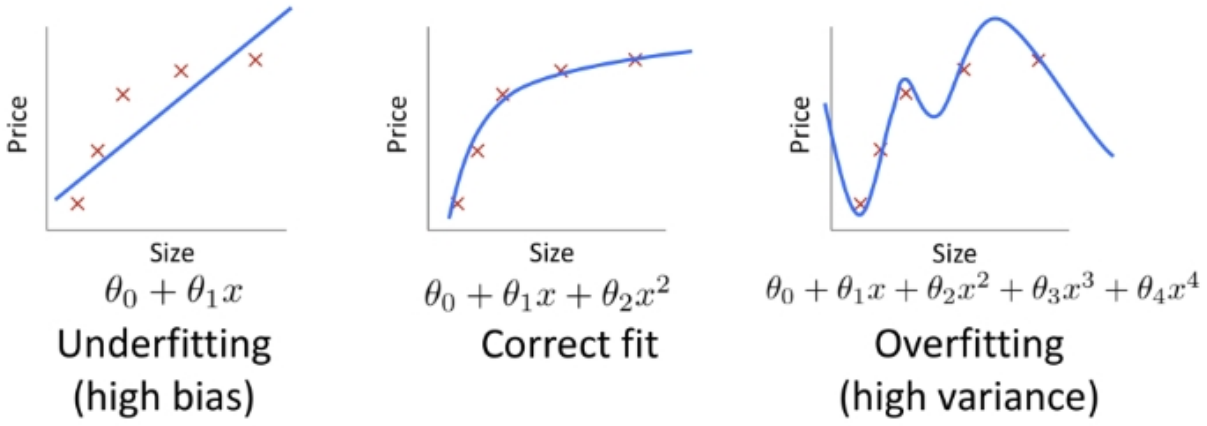
Trả ra x thuộc $[-1, 1]$

1.4. Unit vector

$$x := \frac{x}{||x||}$$

Thường dùng để scale ảnh

Quality of Fit



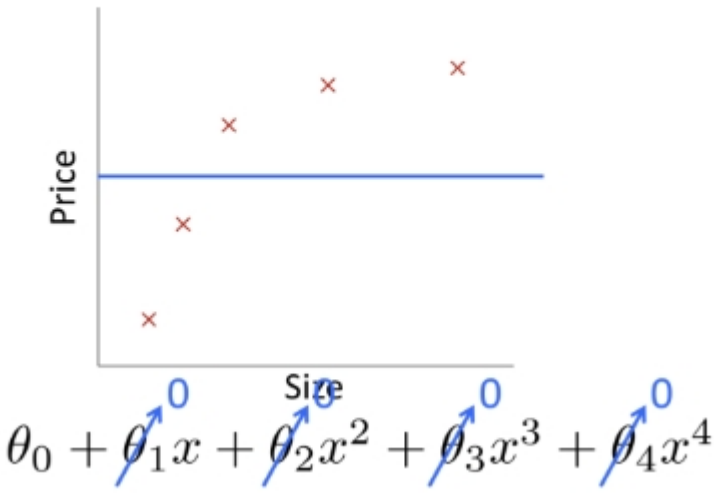
Regularization

Phương pháp giúp tự động control độ phức phức tạp của learned hypothesis
Ý tưởng: penalize những θ_j lớn

Thêm vào loss function một lượng $\frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{d}\theta_j^2$

$$J(\theta) = \frac{1}{2n}\sum_{i=1}^{n}(h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{d}\theta_j^2$$

- What happens if we set λ to be huge (e.g., 10^{10})?



Lecture 2: Logistic Regression

#AI/MachineLearning/Classification
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning
#AI/MachineLearning/Metrics

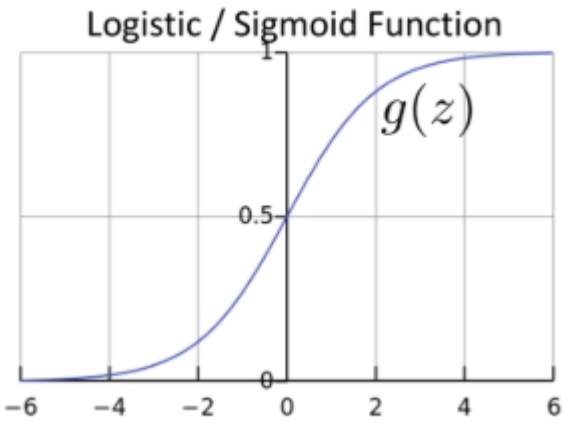
Đây là thuật toán dùng cho mục đích Classification (Binary hoặc Multi-class classification)

Thuật toán sẽ phân loại dựa trên Xác suất, tức thay vì predict data sample đó thuộc class nào, thuật toán sẽ trả ra xác suất data sample đó thuộc về class nhất định.

Logistic Regression thực ra là Linear Regression được bọc bởi một hàm có khả năng phân loại dữ liệu.

$$h_\theta = g(\theta^T x), g(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

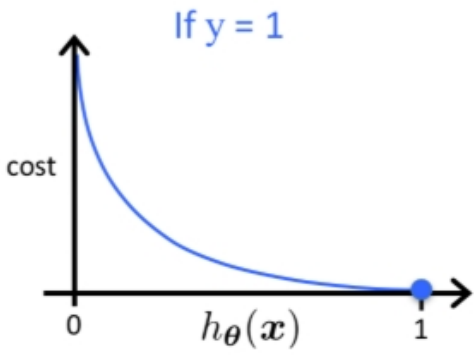
Và $0 \leq h_\theta(x) \leq 1$



Loss Function

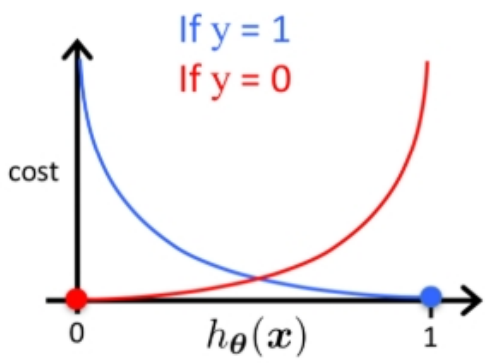
$$J(\theta) = \begin{cases} -\log(h_\theta(x)) & \text{if} \quad y = 1 \\ -\log(1 - h_\theta(x)) & \text{if} \quad y = 0 \end{cases}$$

Việc thêm hàm $\log$ vào giúp mô hình penalize những trường hợp predict sai.



if $y = 1$:

- $J(\theta) = 0$ if prediction is correct.
- As $h_\theta(x) \to 0, J(\theta) \to \infty$.
- This loss function captures intuition that larger mistakes should get larger penalties. Example: predict $h_\theta(x) = 0$, but $y = 1$.



if $y = 0$:

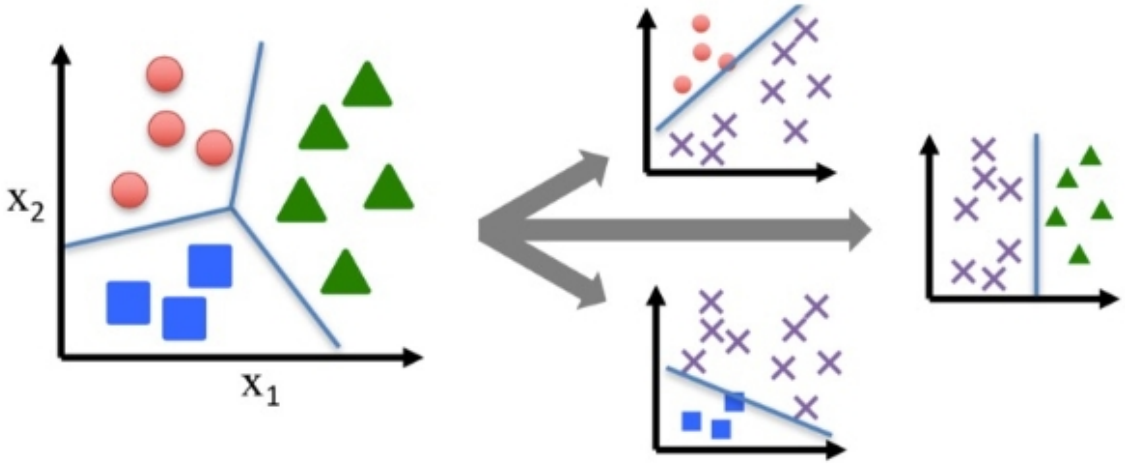
- $J(\theta) = 0$ if prediction is correct.
- As $h_\theta(x) \to 1, J(\theta) \to \infty$.
- This loss function captures intuition that larger mistakes should get larger penalties. Example: predict $h_\theta(x) = 1$, but $y = 0$.

Suy ra Loss Function cho toàn bộ dataset

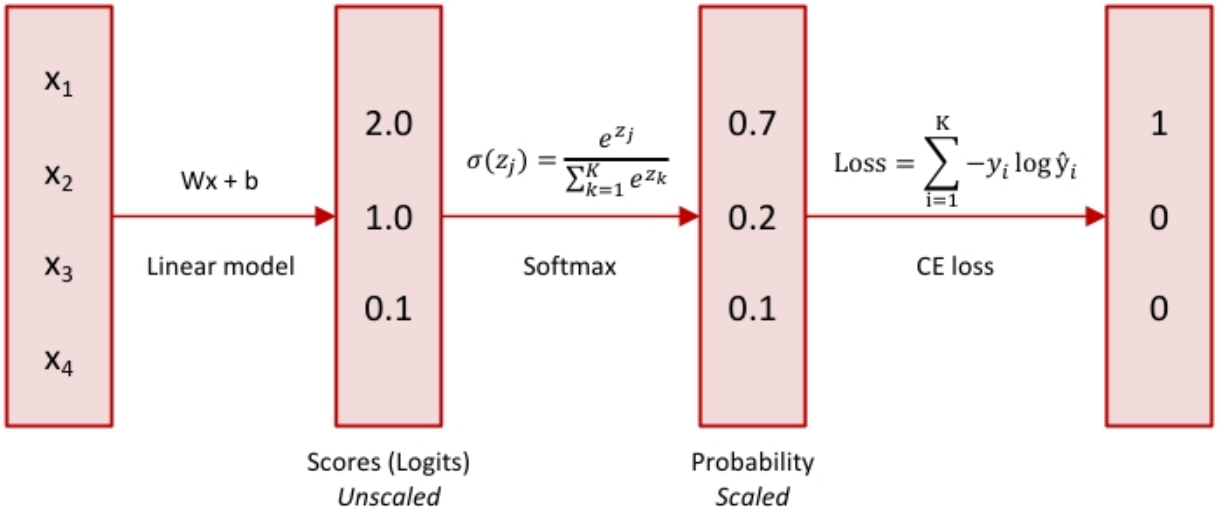
$$J(\theta) = \frac{-1}{m}\sum_{i=1}^{m}[y^{(i)}\log(h_\theta(x^{(i)})) + (1-y^{(i)})\log(1-h_\theta(x^{(i)}))]$$

Tương tự như Linear Regression, ta cũng thêm đại lượng $\lambda\sum_{j=1}^{d}\theta_j^2$ để Regularization

Multi-class classification



Softmax



Metrics

	Prediction YES	Prediction NO
Actual YES	True Positive TP	False Negative FN
Actual NO	False Positive FP	True Negative TN

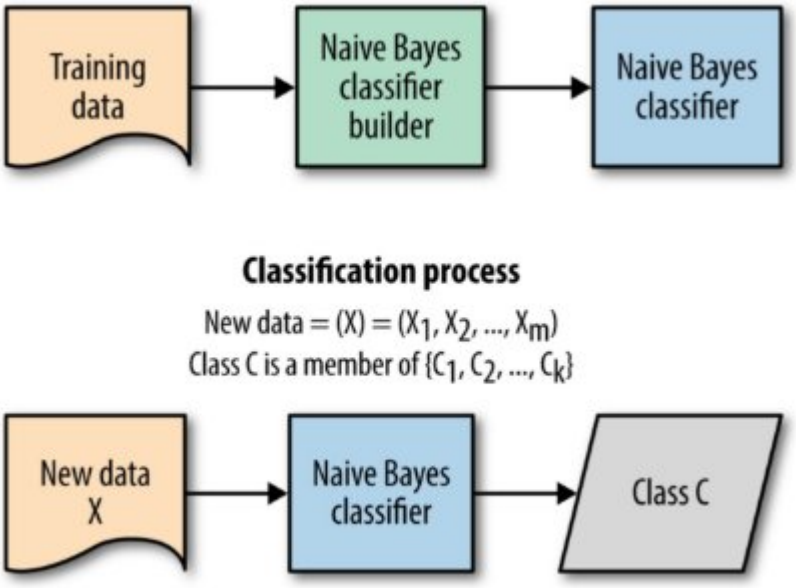
$$Precision = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$Recall = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$F1 = \frac{2 \times Precision \times Recall}{Precision + Recall}$$

Lecture 3: Naive Bayes Classification

#Statistic/BayesTheorem
#AI/MachineLearning/Classification
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning



Chữ "naive" có ý nghĩa giả định sự xuất hiện của một feature đang xét là độc lập với sự xuất hiện của các feature khác

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	Hot	High	Weak	No
D2	Sunny	Hot	High	Strong	No
D3	Overcast	Hot	High	Weak	Yes
D4	Rain	Mild	High	Weak	Yes
D5	Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
D7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
D8	Sunny	Mild	High	Weak	No
D9	Sunny	Cool	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	Mild	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
D12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
D13	Overcast	Hot	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	Mild	High	Strong	No

Playing Tennis statistics under various environmental conditions

Bayes Theorem

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

Trong đó: $P(A|B)$ là xác suất xuất hiện của A được cho trước bởi sự kiện B

Ví dụ về Bayes Theorem: Tính xác suất của một lá bài Queen được cho bởi Face (là bài hình)

- Without Bayes Theorem:

$$P(Queen|Face) = \frac{4}{12} = \frac{1}{3}$$

- With Bayes Theorem:

$$P(Queen|Face) = \frac{P(Face|Queen) \times P(Queen)}{P(Face)} = \frac{1 + \frac{4}{52}}{\frac{12}{52}} = \frac{1}{3}$$

Bayes Theorem for Naive Bayes Classifier

Bài toán như sau:

- Features: $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$
- Classes: $\{C_1, C_2, \ldots, C_3\}$
  Mục tiêu: Tính xác suất điều kiện của một data sample mới với các feature $\{x_1, \ldots, x_n\}$ thuộc vào class C_i nào

$$P(C_i|x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{P(x_1, x_2, \ldots, x_n|C_i) \times P(C_i)}{P(x_1, x_2, \ldots, x_n)}, \forall 1 \leq i \leq k$$

trong đó: $P(x_1, x_2, \ldots, x_n) = P(x_1 \cap x_2 \cap \ldots \cap x_n)$

Thực tế, việc collect dữ liêu cho $P(x_1, \ldots, x_n|C_i)$ và $P(x_1, \ldots, x_n)$ rất khó khăn. Do đó, chúng ta sẽ sử dụng các feature độc lập với nhau. Khi đó,

$$P(A, B) = P(A) \times P(B)$$

nếu A, B độc lập.
Suy ra: $P(A, B|C) = P(A|C) \times P(B|C)$

Suy ra

$$P(C_i|x_1, x_2, \ldots, x_n) = \frac{P(x_1, x_2, \ldots, x_n|C_i) \times P(C_i)}{P(x_1, x_2, \ldots, x_n)} = \frac{P(C_i) \prod_{m=1}^{n} P(x_m|C_i)}{P(x_1, \ldots, x_n)}$$

Và class ta cần tìm sẽ là:

$$class = \text{argmax}_{C_i} P(C_i) \prod_{m=1}^{n} P(x_m|C_i)$$

Ví dụ

(Lưu ý: Phần tính toán có ra thi)

Đề bài:

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	Hot	High	Weak	No
D2	Sunny	Hot	High	Strong	No
D3	Overcast	Hot	High	Weak	Yes
D4	Rain	Mild	High	Weak	Yes
D5	Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
D7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
D8	Sunny	Mild	High	Weak	No
D9	Sunny	Cool	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	Mild	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
D12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
D13	Overcast	Hot	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	Mild	High	Strong	No

P(Play=Yes)=?
P(Play=No)=?

Outlook	Play=Yes	Play=No
Sunny	?	?
Overcast	?	?
Rain	?	?

Temp	Play=Yes	Play=No
Hot	?	?
Mild	?	?
Cool	?	?

Humid	Play=Yes	Play=No
High	?	?
Normal	?	?

Wind	Play=Yes	Play=No
Strong	?	?
Weak	?	?

Đếm các feature theo bảng bên phải chia cho số lượng data sample

Day	Outlook	Temperature	Humidity	Wind	PlayTennis
D1	Sunny	Hot	High	Weak	No
D2	Sunny	Hot	High	Strong	No
D3	Overcast	Hot	High	Weak	Yes
D4	Rain	Mild	High	Weak	Yes
D5	Rain	Cool	Normal	Weak	Yes
D6	Rain	Cool	Normal	Strong	No
D7	Overcast	Cool	Normal	Strong	Yes
D8	Sunny	Mild	High	Weak	No
D9	Sunny	Cool	Normal	Weak	Yes
D10	Rain	Mild	Normal	Weak	Yes
D11	Sunny	Mild	Normal	Strong	Yes
D12	Overcast	Mild	High	Strong	Yes
D13	Overcast	Hot	Normal	Weak	Yes
D14	Rain	Mild	High	Strong	No

P(Play=Yes)=9/14
P(Play=No)=5/14

Outlook	Play=Yes	Play=No
Sunny	2/9	3/5
Overcast	4/9	0/5
Rain	3/9	2/5

Temp	Play=Yes	Play=No
Hot	2/9	2/5
Mild	4/9	2/5
Cool	3/9	1/5

Humid	Play=Yes	Play=No
High	3/9	4/5
Normal	6/9	1/5

Wind	Play=Yes	Play=No
Strong	3/9	3/5
Weak	6/9	2/5

Sau đấy, dùng công thức Bayes, tính ra xác suất đi chơi (hoặc không đi chơi) dựa vào feature của một data sample mới

Test phase
x'=(Outlook=**Sunny**, Temp=**Cool**,
Humidity=**High**, Wind=**Strong**)

P(Yes|x')=P(Yes)P(Sunny|Yes)P(Cool|Yes)P(High|Yes)P(Strong|Yes)

P(No|x')=P(No)P(Sunny|No)P(Cool|No)P(High|No)P(Strong|No)

P(Play=Yes)=9/14
P(Play=No)=5/14

Wind	Play=Yes	Play=No
Strong	3/9	3/5
Weak	6/9	2/5

Outlook	Play=Yes	Play=No
Sunny	2/9	3/5
Overcast	4/9	0/5
Rain	3/9	2/5

Temp	Play=Yes	Play=No
Hot	2/9	2/5
Mild	4/9	2/5
Cool	3/9	1/5

Humid	Play=Yes	Play=No
High	3/9	4/5
Normal	6/9	1/5

Suy ra:

$$P(Yes|x') = 0.0053 < 0.0206 = P(No|x')$$

Suy ra Label của x' là **No**

Gaussian Naive Bayes

Đây là phần dành cho các feature liên tục (Continuous-valued Features). Ví dụ: Nhiệt độ, áp suất, lượng mưa theo giờ,...

Ta sẽ sử dụng công thức xác suất tuân theo phân phối chuẩn là

$$P(x_i|y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_y^2}} \times \exp(\frac{-(x_i - \mu_y)^2}{2\sigma_y^2})$$

Example: Continuous-valued Features

- Temperature is naturally of continuous value.

  Yes: 25.2, 19.3, 18.5, 21.7, 20.1, 24.3, 22.8, 23.1, 19.8

  No: 27.3, 30.1, 17.4, 29.5, 15.1

- Estimate mean and variance for each class

$$\mu = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_n, \quad \sigma^2 = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}(x_n - \mu)^2 \qquad \begin{array}{l} \mu_{Yes} = 21.64, \ \sigma_{Yes} = 2.35 \\ \mu_{No} = 23.88, \ \sigma_{No} = 7.09 \end{array}$$

- **Learning Phase**: output two Gaussian models for P(temp|C)

$$\hat{P}(x \mid Yes) = \frac{1}{2.35\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-21.64)^2}{2\times 2.35^2}\right) = \frac{1}{2.35\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-21.64)^2}{11.09}\right)$$

$$\hat{P}(x \mid No) = \frac{1}{7.09\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-23.88)^2}{2\times 7.09^2}\right) = \frac{1}{7.09\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-23.88)^2}{50.25}\right)$$

Laplace Smoothing

Đây là phương pháp giúp tránh trường hợp trong quá trình training, chúng ta tính xác suất bằng 0 với một thuộc tính nhất định, từ đó dẫn đến khi áp dụng công thức Bayes sẽ ra bằng 0 trong mọi data sample mới có cùng thuộc tính. Gây ra tình trạng **overfitting**

Các fix như sau:

Với $P(X = x_i|C = c_j) = \frac{m_i}{n_j}$

Thì ta sẽ:

$$P(X = x_i|C = c_j) = \frac{m_i + 1}{n_j + |values(X)|}$$

với

- m_i là số data sample có giá trị x_i tại thuộc tính X và thuộc lớp c_j
- n_j là số lượng data sample thuộc lớp c_j
- $|values(X)|$ là số lượng unique value tại feature X

Log-probability

Trong thực tế, việc các xác suất rất nhỏ xảy ra là chuyện bình thường và trong công thức ta rút ra ở trên, ta phải nhân chúng lại với nhau, gây ra hiện tương underflow. Dẫn đến máy tính không thể tính toán chính xác các giá trị này và gây ra hiện tương sai số.

Do đó, ta cần biến đổi công thức xác định class một chút:

$$class = \text{argmax}_{C_i} P(C_i) \prod_{m=1}^{n} P(x_m|C_i) = \text{argmax}_{C_i} \log P(C_i) + \sum_{m=1}^{n} \log P(x_m|C_i)$$

Summary

Ưu điểm:

- Train nhanh
- Predict nhanh
- Không nhạy cảm với các đặc trưng không liên quan
- Xử lý tốt với cả dữ liệu liên tục và rời rạc
- Xử lý tốt với streaming data
- Tính giải thích rất tốt
  Nhược điểm:
- Chỉ hoạt động tốt với các feature độc lập lẫn nhau

Lecture 4: Decision Tree & Random Forest

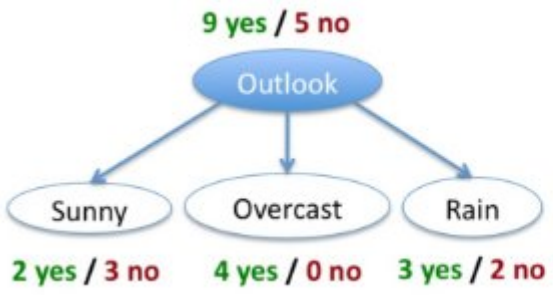
#AI/MachineLearning/Classification
#AI/MachineLearning/Regression
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning
#AI/Algorithm
#DataMining/DataPreprocessing/FeatureExtraction

Decision Tree là thuật toán dựa vào cấu trúc cây.

```
node = Root
examples = Training Set
Split ( node, {examples} ):
        1. Find A, the best attribute for splitting the
{examples}
```

```
        2. Create decision nodes for attribute A (i.e., child
nodes
        of node)
        3. Split training {examples} to child nodes
        4. If examples perfectly classified (subset is pure):
                        STOP
                else: iterate over new child nodes
                        Split (child_node, {subset of
examples} )
```

Giải nghĩa "*subset is pure*":



Như hình vẽ, ta thấy việc chọn Outlook feature tạo ra một nhánh đi theo value Overcast giúp predict một cách hoàn hảo (completely certain 100%). Suy ra Outlook là pure subset

Entropy

$$H(S) = -(p_{(+)} \log p_{(+)} + p_{(-)} \log p_{(-)})$$

- Impure (3 yes / 3 no)

$$H(S) = -\frac{3}{6}\log\frac{3}{6} - \frac{3}{6}\log\frac{3}{6} = 1$$

- Pure (4 yes / 0 no)

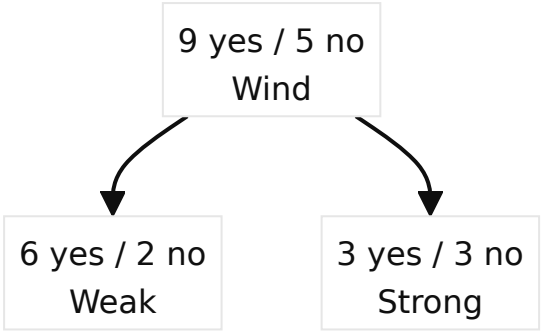
$$H(S) = -\frac{4}{4}\log\frac{4}{4} - \frac{0}{4}\log\frac{0}{4}0$$

Information Gain

Đây là công thức giúp xác định xem đâu là feature phù hợp nhất để làm node

$$Gain(S,A) = H(S) - \sum_{V \in Values(A)} \frac{|S_v|}{|S|} H(S_v)$$

Ví dụ;

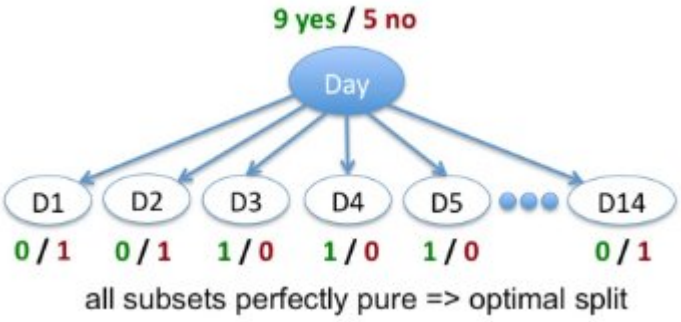


$$Gain(S, Wind) = H(S) - \frac{8}{14} H(S_{Weak}) - \frac{6}{14} H(S_{Strong})$$

$$= 0.94 - \frac{8}{14} * 0.81 - \frac{6}{14} * 1 = 0.049$$

Ta sẽ chọn feature nào có gía trị $Gain(S,A)$ cao nhất

Có một vấn đề khá lớn với với Information Gain là:



Để tránh tình trạng này xảy ra, ta sẽ sử dụng GainRatio

$$SplitEntropy(S,A) = -\sum_{V \in Values(A)} \frac{|S_v|}{|S|} \log \frac{|S_v|}{|S|}$$

$$GainRatio(S,A) = \frac{Gain(S,A)}{SplitEntropy(S,A)}$$

Avoid Overfitting for Decision Tree

1. Dừng việc phát triển cây khi dữ liệu bị split không còn ý nghĩa
2. Loại bỏ các thuộc tính không liên quan

3. Sử dụng Post-prunning

Post-prunning cho phép cây phân loại hoàn toàn tập huấn luyện rồi mới cắt tỉa

Pre-prunning dừng việc phát triển cây sớm hơn, trước khi nó hoàn toàn phân chia tập dữ liệu

Continuous Variables

Các bước để xử lý trường hợp biến liên tục

1. Sort value of feature, kể cả class labels
2. Chọn cut point (sử dụng information gain để chọn)

Ví dụ:

64	65	68	69	70	71	72	72	75	75	80	81	83	85
Yes	No	Yes	Yes	Yes	No	No	Yes	Yes	Yes	No	Yes	Yes	No

Temp < 71.5: yes = 4, no = 2
Temp ≥ 71.5: yes = 5, no = 3

$$H(Temp < 71.5) = -\frac{4}{6}\log\frac{4}{6} - \frac{2}{6}\log\frac{2}{6} = 0.918$$

$$H(Temp \geq 71.5) = -\frac{5}{8}\log\frac{5}{8} - \frac{3}{8}\log\frac{3}{8} = 0.954$$

$$H(S) = -\frac{9}{14}\log\frac{9}{14} - \frac{5}{14}\log\frac{5}{14} = 0.940$$

$$Gain(S, Temp) = H(S) - \frac{6}{14}H(Temp < 71.5) - \frac{8}{14}H(Temp \geq 71.5)$$

$$= 0.940 - \frac{6}{14} * 0.918 - \frac{8}{14} * 0.954 = 0.001$$

Multi-class Classification

Sử dụng công thức Entropy cho Multi-class

$$H(S) = -\sum_{c} p_c \log(p_c)$$

Random Forest

Training: grow K different decision trees:

- Pick a random subset S_{random} of training examples.
- Grow a full decision tree (no pruning), compute information gain based on S_{random} instead of full set.
- Repeat for K decision trees.

Inference: given a new data point X:

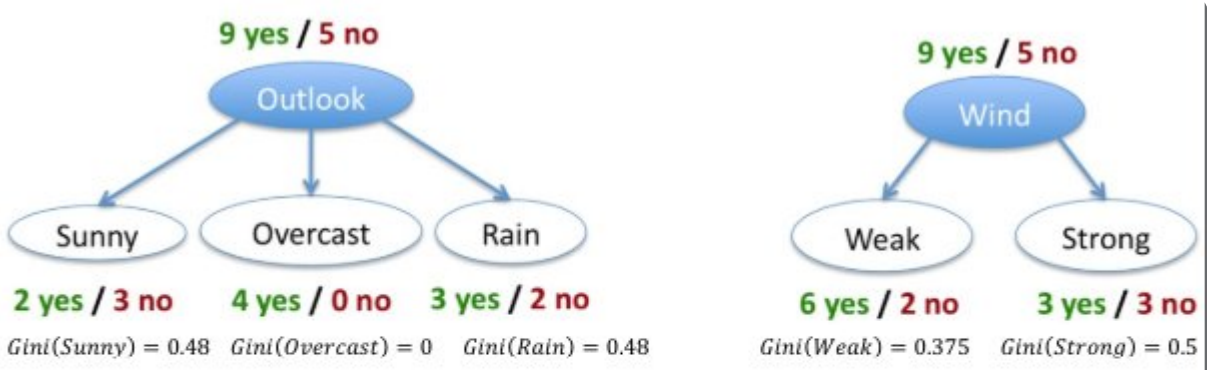
- Classify X using each of the K trees.
- Use majority vote: class predicted most often.

Fast, scalable, state-of-the-art performance.

Gini impurity

1. Gini impurity of a dataset

$$Gini(D) = \sum_{i=1}^{k} p_i(1-p_i) = 1 - \sum_{i=1}^{k} p_i^2$$



$$Gini(Sunny) = \frac{2}{5}\left(1-\frac{2}{5}\right) + \frac{3}{5}\left(1-\frac{3}{5}\right) = 1 - \left(\frac{2}{5}\right)^2 - \left(\frac{3}{5}\right)^2 = 0.48$$

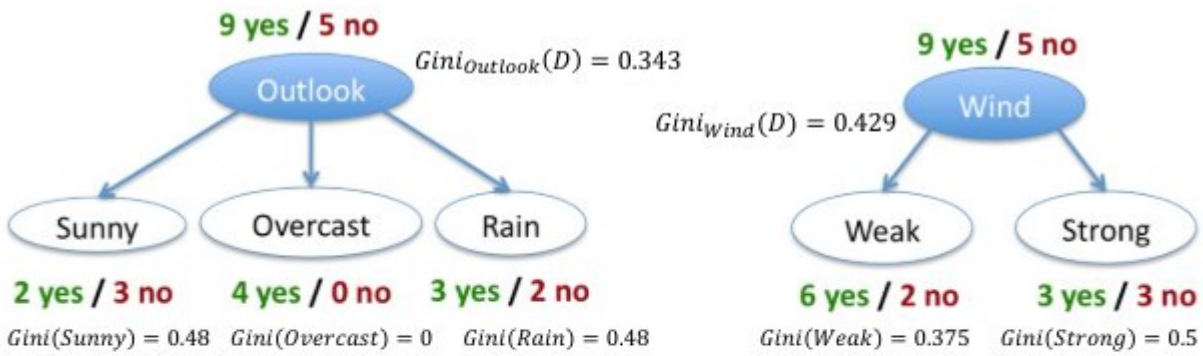
$$Gini(Weak) = \frac{6}{8}\left(1-\frac{6}{8}\right) + \frac{2}{8}\left(1-\frac{2}{8}\right) = 1 - \left(\frac{6}{8}\right)^2 - \left(\frac{2}{8}\right)^2 = 0.375$$

$Gini = 0 \implies$ **Pure**
$Gini = 0.5 \implies$ **Equal**
$Gini = 1 \implies$ **Random**

2. Gini impurity of an attribute

$$Gini_A(D) = \sum_{s=1}^{m} \frac{|D_s|}{|D|} Gini(D_s)$$

Chọn attribute có Gini impurity bé nhất để chia



$$Gini_{Outlook}(D) = \frac{5}{14}0.48 + \frac{4}{14}0 + \frac{5}{14}0.48 = 0.343$$

$$Gini_{Wind}(D) = \frac{8}{14}0.375 + \frac{6}{14}0.5 = 0.429$$

Outlook is chosen!

3. Gini information gain

$$\Delta Gini(A) = Gini(D) - Gini_A(D)$$

Chọn attribute có Gini information gain cao nhất để split

$$\Delta Gini(Outlook) = 0.459 - 0.343 = 0.116$$

$$\Delta Gini(Wind) = 0.459 - 0.429 = 0.03$$

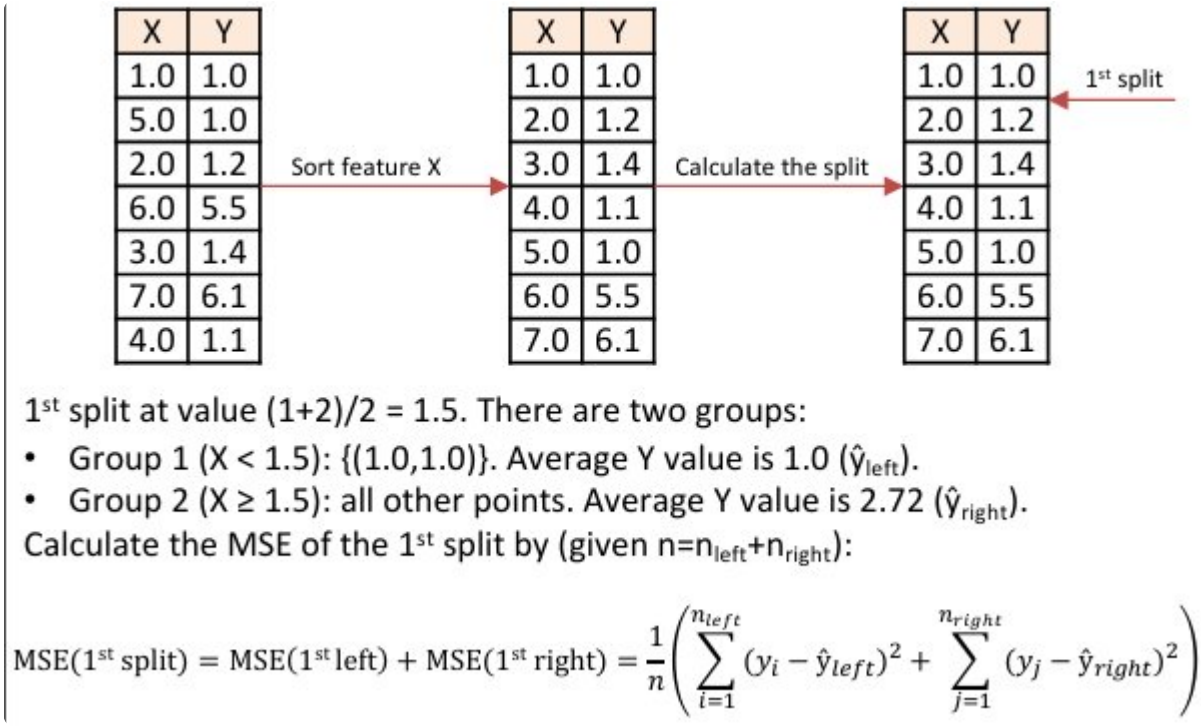
=> Outlook is chosen

Regression Tree

Idea: Tìm best point để split dataset thành 2 phân sao cho MSE nhỏ nhất tại điểm đó

Steps:

1. **Sort** data dựa vào feature
2. **Brute-force** tất cả các điểm có thể chia, tính MSE
3. **Choose** minimum MSE, từ đó chọn được best point



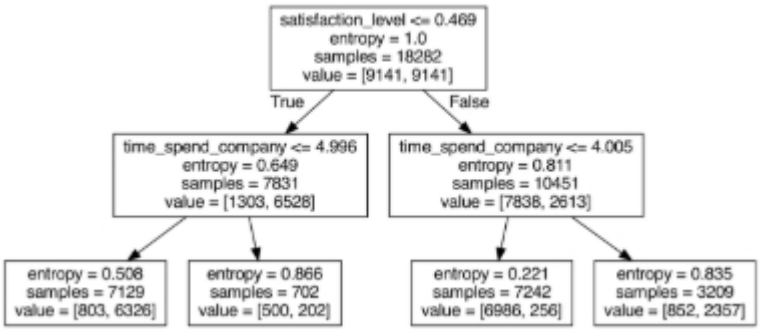
Feature Importance - A single decision tree

Idea: Tính số điểm "importance" của từng data feature. Điểm càng cao thì độ ảnh hưởng của feature đó càng lớn

$$I_i = \sum_{i_n=i} [p(n)purity(n) - \sum_{n_{child}} p(n_{child})purity(n_{child})]$$

$purity(n)$ ở đây có thể dùng Entropy, Gini hay Squared Error để tính

Ví dụ:



$$\text{satisfaction_level} = \frac{18282}{18282} * 1 - \frac{7831}{18282} * 0.649 - \frac{10451}{18282} * 0.811 = 0.2584$$

$$\text{time_spend_company} = (\frac{7831}{18282} * 0.649 - \frac{7129}{18282} * 0.508 - \frac{702}{18282} * 0.866)$$

$$+(\frac{10451}{18282} * 0.811 - \frac{7242}{18282} * 0.221 - \frac{3209}{18282} * 0.835) = 0.2761$$

Tương tự cho Gini, chỉ cần thay đổi giá trị $purity(n)$

Feature Importance - Random Forest

Idea: Tính điểm Importance of Feature I trên từng cây đơn rồi cộng lại chia số cây.

$$I_i = \frac{1}{|B|} \sum_{T \in B} I_i(T)$$

Lecture 5: K-Means Clustering

#AI/MachineLearning/UnsupervisedLearning
#AI/MachineLearning/Clustering

Unsupervised Learning

Dữ liệu đầu vào chỉ có các feature ($\overline{X}$), không hề có label (Y) như supervised learning

Advantage: không cần mất thời gian và tiền bạc để đánh nhãn dữ liệu

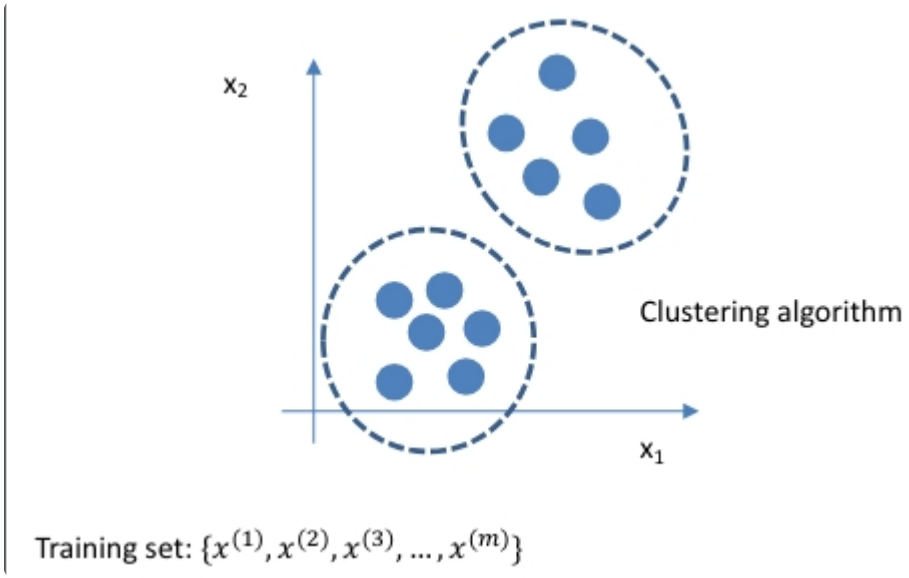
Challenge: mục tiêu không còn đơn giản chỉ là predict

Ví dụ: Phân loại bệnh theo biểu hiện gene, chia nhóm người mua sắm dựa vào các đặc trưng mua hàng, ...

Clustering

Clustering là kỹ thuật tìm **subgroups** in a dataset. Mục tiêu là chia dữ liệu thành các tập riêng biệt dựa vào đặc trưng của từng data sample.

Từ đó đưa ra kết luận là 2 hay nhiều data sample là giống hay khác nhau dựa trên mục đích



K-Means Clustering

Định nghĩa

$C_1, \ldots, C_k$ là các cluster, chúng được xác định dựa vào 2 điều kiện sau:

1. $C_1 \cup C_2 \cup \ldots \cup C_k = \{1, \ldots, n\}$ (tức bất kỳ data sample nào cũng thuộc 1 cluster)
2. $C_k \cap C_{k'} = \varnothing, \forall k \neq k'$, (tức ko cluster nào bị overlap)
   For instance, một data sample thuộc về 1 cluster

Mục tiêu

K-Means clustering càng tốt khi **within-cluster variation** càng nhỏ. $WCV(C_k)$ là giá trị khoảng cách của các data sample thuộc cùng 1 cluster.

Suy ra, mục tiêu của K-Means Clustering là

$$\mathrm{minimize}\{\sum_{\mathrm{i=1}}^{\mathrm{k}}\mathrm{WCV}(\mathrm{C_i})\}$$

Nếu chúng ta sử dụng công thức khoảng cách là Euclidean thì

$$WCV(C_k) = \frac{1}{|C_k|}\sum_{i,i'\in C_k}\sum_{j=1}^{p}(x_{ij} - x_{i'j})^2$$

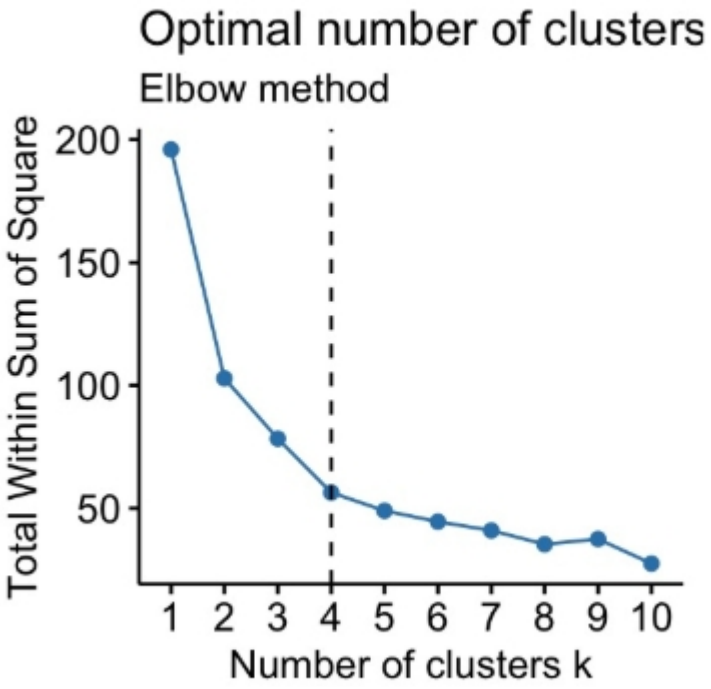
Với $|C_k|$ là số lượng data sample (hay observations) trong 1 cluster thứ k

Thụât toán

1. Random đánh số cluster cho từng observation từ 1 đến k
2. Lặp cho tới khi các cluster không còn thay đổi
   2.1. Với mỗi k clusters, tìm centroid. Centroid của cluster là vector các trung bình cộng các feature thuộc về observation (quan sát) trong cluster
   2.2. Đánh số cluster của observation dựa vào khoảng cách ngắn nhất đến centroid của từng cluster.

Chọn k cho phù hợp

- Áp dụng thụât toán cho các giá trị k khác nhau, ví dụ: 1 đến 10
- Với mỗi k, tính WCV
- **Plot the curve** của WVC so với k
- Chọn k là điểm có sự giảm ở lần tiếp theo không đáng kể so với lần giảm trước đó.



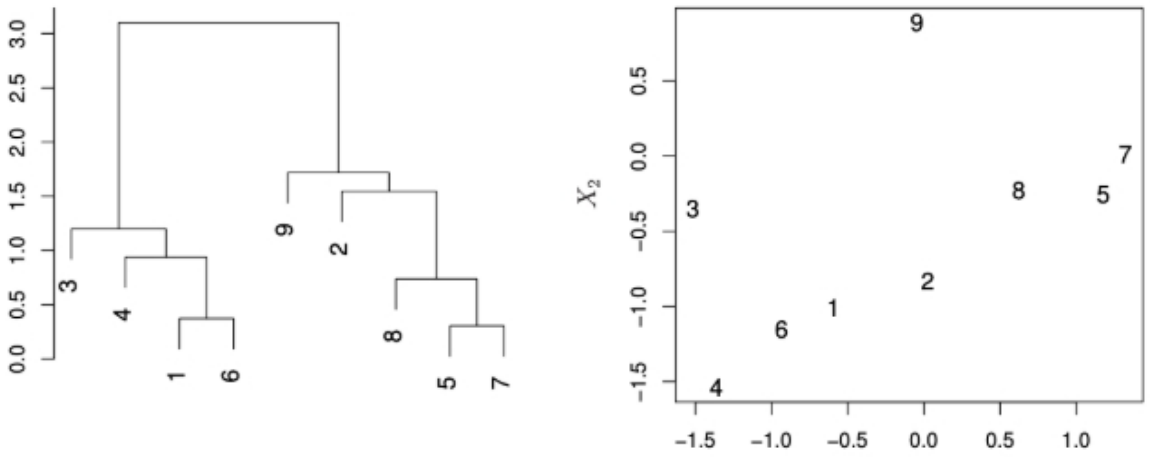
Hierarchical Clustering

Khác với K-Means Clustering, thuật toán Hierarchical Clustering cần phải xác định giá trị k trước. Đây có thể là một nhược điểm

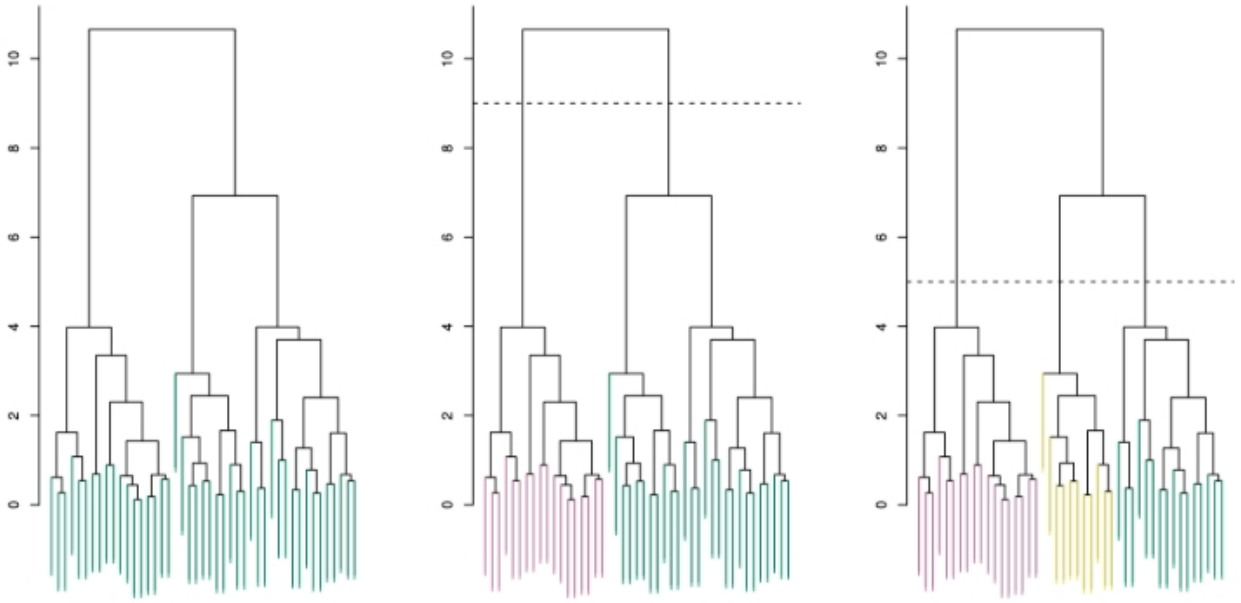
Trong section này, ta sẽ tìm hiểu **bottom-up** hoặc **agglomerative clustering**

Thuật toán

1. Set từng điểm là một cluster riêng biệt
2. Xác định cặp cluster gần nhất và merge chúng
3. Lặp lại cho tới khi toàn bộ điểm thuộc về một cluster



Sau đó, ta chọn k phù hợp bằng cách kẻ một đường trên dendogram



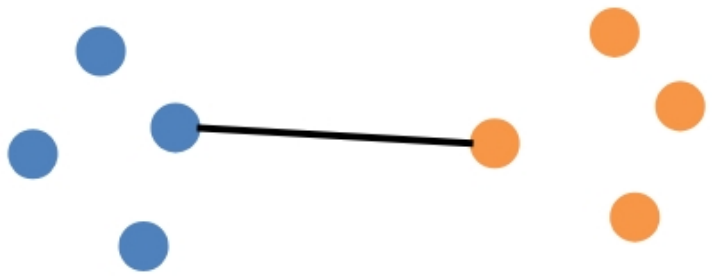
Linkage

Ta sẽ tìm hiểu cách để tính khoảng cách của các cluster. Bởi vì một cluster sẽ có nhiều point nên sẽ có nhiều cách tính chẳng hạn như:

- Single Link

Distance between closest elements in clusters

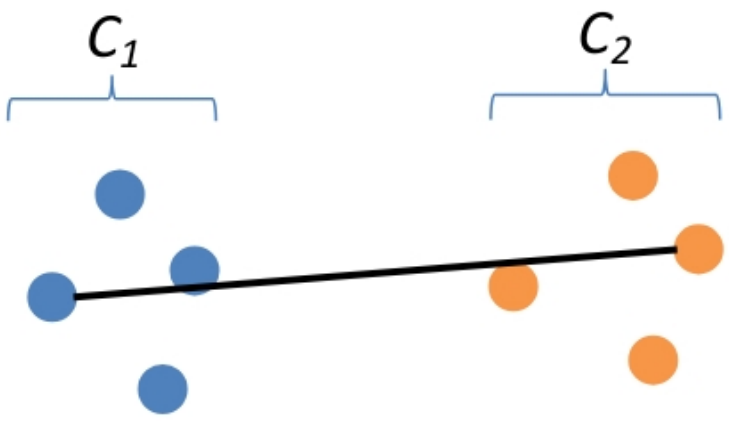
$$D(C_1, C_2) = \min_{x_1 \in C_1, x_2 \in C_2} D(x_1, x_2)$$



- Complete link

Distance between farthest elements in clusters

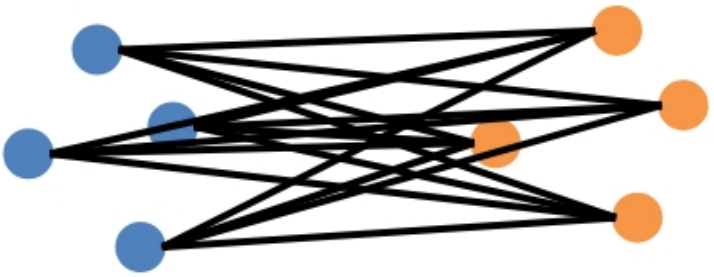
$$D(C_1, C_2) = \max_{x_1 \in C_1, x_2 \in C_2} D(x_1, x_2)$$



- Average link

Average of all pairwise distances

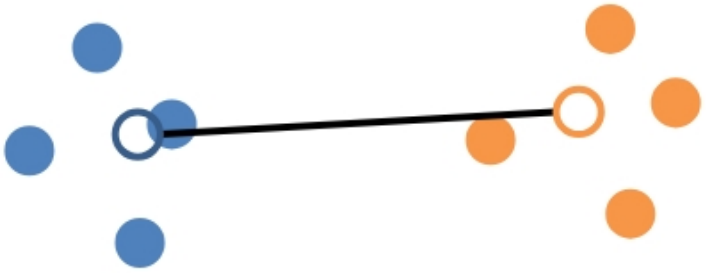
$$D(C_1, C_2) = \frac{1}{|C_1|}\frac{1}{|C_2|}\sum_{x_1 \in C_1}\sum_{x_2 \in C_2} D(x_1, x_2)$$



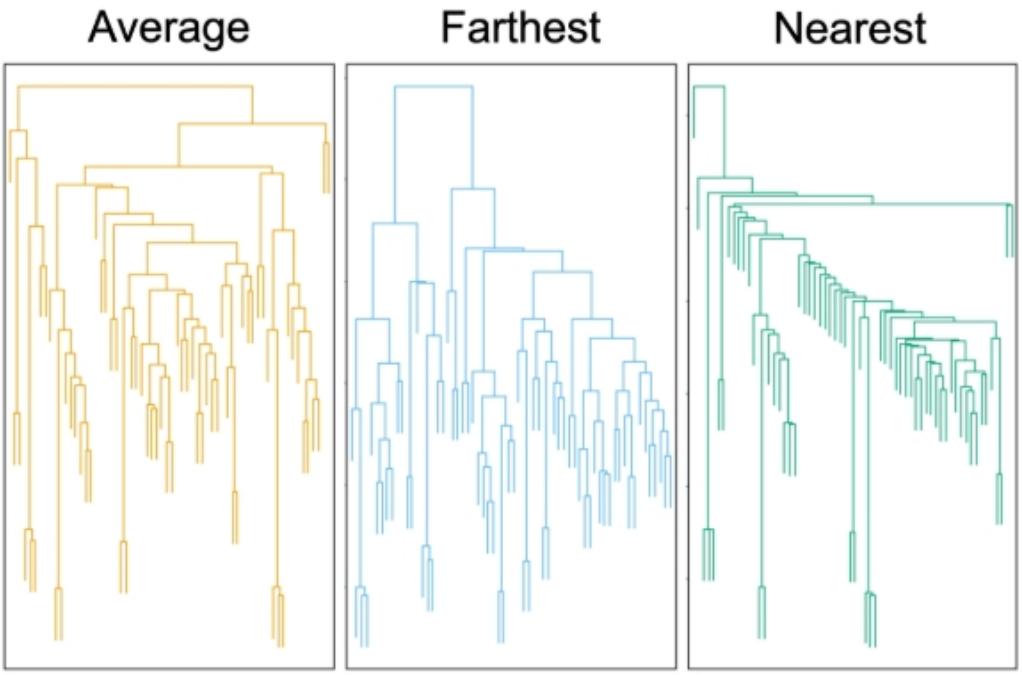
- Centroid link

Distance between centroids of two clusters

$$D(C_1, C_2) = D\left(\left(\frac{1}{|C_1|}\sum_{x_1 \in C_1} \bar{x}\right), \left(\frac{1}{|C_2|}\sum_{x_2 \in C_2} \bar{x}\right)\right)$$



Cùng so sánh 4 loại linkage nhé



Mouse tumor data from [Hastie *et al.*]

Lưu ý: xác định khoảng cách giữa các cluster xong rồi mới dựa vào khoảng cách đó để tìm đâu là cluster nào gần nhất (khoảng cách vừa tính được nhỏ nhất). Tránh nhầm lẫn

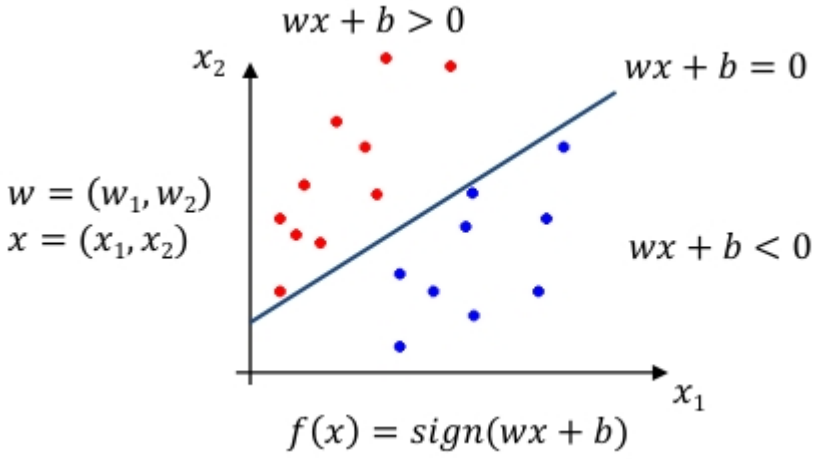
Lecture 06: Support Vector Machine (SVM)

#AI/MachineLearning/Classification
#AI/MachineLearning/SupervisedLearning

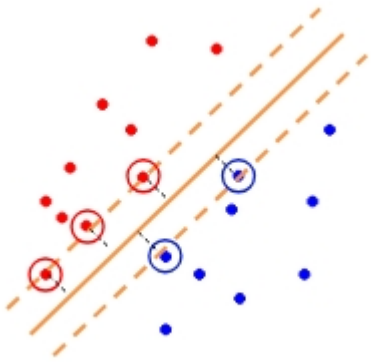
Introduce

Đây là thuật toán Classification (Supervised Learning), và sẽ đi tìm global optimum (not a local optimum)

SVM là một trong những model hiệu quả nhất về classification problem. Đặc biệt, model xử lý binary classification (về multiclass thì sử dụng phương pháp One-vs-All)



Nhìn vào hình, ta có thể thấy ko chỉ đường kẻ ấy là đường duy nhất có thể chia tách dữ liệu. Thế thì đường nào mới là đường tối ưu



Các training sample nằm trên đường biên (margin line) được gọi là **support vectors** nhằm định hướng optimal hyperplane (siêu phẳng tối ưu)

Optimal hyperplane là hyperplane có khoảng cách giữa margin line lớn nhất

Gọi M là khoảng cách giữa hai margin line.
Chọn x^- sao cho $f(x^-) = -1$, x^+ sao cho $f(x^+) = 1$

Suy ra ta có

$$\begin{cases} wx^+ + b = 1 \\ wx^- + b = -1 \end{cases}$$

$$\implies w(x^+ - x^-) = 2 \implies M = \frac{2}{||w||}$$

Suy ra

$$\text{argmaxM} = \text{argmax}\frac{2}{||\text{w}||} = \text{argmin}\frac{||\text{w}||}{2} = \text{argmin}\frac{1}{2}||\text{w}||^2$$

với ràng buộc

$$\begin{cases} y^{(i)} = 1 \to wx^{(i)} + b \geq 1 \\ y^{(i)} = -1 \to wx^{(i)} + b \leq -1 \end{cases}$$

Suy ra:

$$\text{argmin}\frac{1}{2}||\text{w}||^2 \quad \text{with constraint} \quad \text{y}^{(\text{i})}(\text{wx}^{(\text{i})} + \text{b}) \geq 1$$

Exercise: Optimization Problem

Find $\text{argmin} f(x, y) = x^2 + y^2$ với $g(x, y) = x + y = 1$

High school Solution

$y = 1 - x \implies f(x) = x^2 + (1 - x)^2 = 2x^2 - 2x + 1$

$$f'(x) = 4x - 2 = 0 \implies x = \frac{1}{2} = y$$

University Solution

Ta sẽ sử dụng nhân tử Lagrange

$$\begin{cases} \nabla f(X) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \nabla g_i(X) \\ g_i(X) = k_i \end{cases}$$

$$\begin{cases} \nabla f(x, y) = \lambda \nabla g(x, y) \\ x + y = 1 \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} \left\langle \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y} \right\rangle = \left\langle \lambda \frac{\partial g}{\partial x}, \lambda \frac{\partial g}{\partial y} \right\rangle \\ x + y = 1 \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} \left\langle 2x, 2y \right\rangle = \left\langle \lambda, \lambda \right\rangle \\ x + y = 1 \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} x = \frac{\lambda}{2} \\ x = \frac{\lambda}{2} \\ x + y = 1 \end{cases}$$

$$\implies \begin{cases} x = \frac{1}{2} \\ y = \frac{1}{2} \\ \lambda = 1 \end{cases}$$

$$\implies f_{min}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) = \frac{1}{2}$$

Karush-Kuhn-Tucker (KTT, inequality constraint)