Máy học véc-tơ hỗ trợ (SVM)

Bài toán đối ngẫu

20-27/3/2021

Đối tượng

- Sinh viên Khoa học máy tính

Mục tiêu

- Hiểu được bài toán đối ngẫu của SVM
- Áp dụng gói thư viện quadprog để giải bài toán đối ngẫu.

Tài liệu

- Slide này
- Slides 2 - SVM
- Giáo trình nguyên lý máy học

Kế hoạch

Bài toán đối ngẫu

5 mins

Bài toán đối ngẫu của SVM

30 mins

Tìm hiểu thư viện tối ưu

5 mins

Cài đặt

30 mins

Bài tập

180 mins

Bài toán gốc và bài toán đối ngẫu

Cho bài toán tối ưu gốc (primal problem):

$$\min_x f(x)$$

Với các ràng buộc:

$$g_i(x) \leq 0$$

Bài toán đối ngẫu Lagrange (dual problem) của nó sẽ là:

$$\max_\alpha \left[\min_x \left(f(x) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(x) \right) \right]$$

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

Bài toán đối ngẫu

Cho bài toán gốc (primal problem):

$$\min_x f(x)$$

Với các ràng buộc:

$$g_i(x) \leq 0$$

Bài toán đối ngẫu Lagrange (dual problem) của nó sẽ là:

$$\max_\alpha \left[\min_x \left(f(x) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i g_i(x) \right) \right]$$

Nhân tử lagrange (Lagrangian multipliers)

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

Bài toán đối ngẫu

Để giải bài toán đối ngẫu, ta thường giải bài toán tìm min trước bằng cách:

1. Xem các α_i như hằng số, lấy đạo hàm riêng phần trong ngoặc () và giải hệ phương trình đạo hàm riêng = 0.
2. Thay các kết quả tìm được vào phần trong (), ta chỉ còn lại bài toán max với 1 số ràng buộc.

Biểu thức trong bài toán max thường biểu diễn ở dạng có lợi hơn cho chúng ta !

Bài toán đối ngẫu Lagrange (dual problem) của nó sẽ là:

$$\max_{\alpha}\left[\min_{x}\left(f(x)+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i g_i(x)\right)\right]$$

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Ta bắt đầu bằng trường hợp khả tách tuyến tính (không có phần tử lỗi):

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}|w|^2$$

Với các ràng buộc:

$$y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1 + x_2^{(i)}w_2 + \ldots - b\right) \geq 1$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Ta bắt đầu bằng trường hợp không khả tách tuyến tính (không có phần tử lỗi):

$$\min_{w,b} \frac{1}{2}|w|^2$$

Biến đổi ràng buộc để dùng bài toán đối ngẫu:

$$1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b \right) \leq 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Bài toán đối ngẫu Lagrange (dual problem) sẽ là:

$$\max_{\alpha}\min_{(w,b)}\left(\frac{1}{2}|w|^2+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i(1-y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1+x_2^{(i)}w_2+\ldots-b\right)\right)$$

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

Cảnh báo:

- Các slide kế tiếp mô tả cách biến đổi bài toán SVM gốc về bài toán SVM đối ngẫu.
- Các bước biến đổi cần kiến thức về đạo hàm riêng và phép toán trên ma trận. Nếu không thích, bạn có thể bỏ qua và đi thẳng đến công thức cuối cùng. Tuy nhiên thiệt thòi về phần bạn :-)

Bài toán đối ngẫu của SVM

Xem α_i là hằng số, giải bài toán min:

$$\min_{(w,b)}\left(\frac{1}{2}|w|^2+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i(1-y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1+x_2^{(i)}w_2+\ldots-b\right)\right)$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Đặt phần trong ngoặc là f(w,b):

$$
\begin{aligned}
f(w,b) = \quad & \frac{1}{2}|w|^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b \right) \\
= \; & \frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2 + \ldots) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b \right)
\end{aligned}
$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Lấy đạo riêng theo w_1:

$$\frac{\partial f}{\partial w_1} = w_1 - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_1^{(i)}$$

Tổng quát, đạo hàm riêng theo w_j:

$$\frac{\partial f}{\partial w_j} = w_j - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}$$

Đạo hàm riêng theo b:

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)}$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Giải hệ phương trình đạo hàm riêng = 0, ta có:

$$\frac{\partial f}{\partial w_j} = w_j - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Hay:

$$w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Áp dụng các kết quả này vào f(w,b):

$$\boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0}$$

$$\boxed{w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}}$$

$$f(w,b) = \frac{1}{2}|w|^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)$$

$$= \frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2 + \ldots) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)$$

Bài toán đối

Thay w vào f:

Thay các w_j vào tổng các bình phương này.

Để đơn giản, ta xét riêng:

$$w_1^2 = \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_1^{(i)}\right)^2$$

$$\boxed{w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}}$$

$$f(w,b) = \quad \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)$$

$$= \frac{1}{2}(w_1^2 + w_2^2 + \ldots) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i (1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

$$
\begin{aligned}
w_1^2 &= \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_1^{(i)}\right)^2 \\
&= \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_1^{(i)}\right)\left(\sum_{j=1}^{m} \alpha_j y^{(j)} x_1^{(j)}\right) \\
&= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} x_1^{(i)} x_1^{(j)}
\end{aligned}
$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

$$w_1^2 + w_2^2 + \ldots = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} x_1^{(i)} x_1^{(j)} + \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} x_2^{(i)} x_2^{(j)} + \ldots$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x_1^{(i)} x_1^{(j)} + x_2^{(i)} x_2^{(j)} + \ldots \right)$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right)$$

Tích vô hướng của 2 véc-tơ.

Bài toán đối ngẫu của SVM

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}$$

Dùng 2 tính chất trên, thế vô tính tổng này.

$$\ldots |w|^2 + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right)$$

$$\ldots \ldots) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left(1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right)$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \left[\alpha_i - \alpha_i y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots\right) + \alpha_i y^{(i)} b\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots\right) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} b$$

$$\boxed{w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}}$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left[1-y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1+x_2^{(i)}w_2+\ldots-b\right)\right]$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\left[\alpha_i-\alpha_i y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1+x_2^{(i)}w_2+\ldots\right)+\alpha_i y^{(i)}b\right]$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}\left(x_1^{(i)}w_1+x_2^{(i)}w_2+\ldots\right)+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}b$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(x_1^{(i)}x_1^{(j)}+x_2^{(i)}x_2^{(j)}+\ldots\right)+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}b$$

$$=\sum_{i=1}^{m}\alpha_i-\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(x^{(i)}\cdot x^{(j)}\right)+\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}b$$

= 0

Bài toán đối ngẫu của SVM

Tóm lại:

$$\frac{1}{2}\left(w_1^2 + w_2^2 + \ldots\right) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)} y^{(j)}\left(x^{(i)} \cdot x^{(j)}\right)$$

và

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\left[1 - y^{(i)}\left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right]$$

$$= \sum_{i=1}^{m}\alpha_i - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)} y^{(j)}\left(x^{(i)} \cdot x^{(j)}\right)$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Hàm mục tiêu:

$$\frac{1}{2}\left(w_1^2 + w_2^2 + \ldots\right) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)}\left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right]$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)}\right) + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)}\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)}\right)$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Thế vào bài toán max, bài toán đối ngẫu Lagrange (dual problem) sẽ là:

$$\max_{\alpha} \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right) \right)$$

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Thành quả:

- Nhờ vào các phép biến đổi ta thu được kết quả này.
- Toán học có vẻ đẹp riêng của nó, phải không bạn !

Bài toán đối ngẫu của SVM

Đổi dấu, bài toán max lại trở thành bài toán min:

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \right)$$

Với các ràng buộc:

$$\boxed{\alpha_i \geq 0}$$

Trường hợp tách được (không có lỗi)

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Áp dụng cách mô hình hoá như thế, bài toán đối ngẫu SVM trong trường hợp **không tách được (có lỗi)** sẽ như sau (chỉ khác chỗ ràng buộc):

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \right)$$

Với các ràng buộc:

$$\boxed{c \geq \alpha_i \geq 0}$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

Đọc thêm:

- Để biết tại sao kết quả được như thế này, xem thêm các slide cuối trong phần PHỤ LỤC.

Bài toán đối ngẫu của SVM

Giải bài toán đối ngẫu ta sẽ tìm được các α_i. Các phần tử $\mathbf{x}^{(i)}$ có $\alpha_i > 0$ tương ứng là véc-tơ hỗ trợ.

Tham số w được tính dựa trên các **véc-tơ hỗ trợ**.

$$w_j = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x_j^{(i)}$$

hay tổng quát

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}$$

Để tính độ lệch (bias) b, chọn 1 **véc-tơ hỗ trợ k** bất kỳ có $\alpha_i < c$:

$$b = w^T x^{(k)} - y^{(k)}$$

$$b = \left(w_1 x_1^{(k)} + w_2 x_2^{(k)} + \ldots\right) - y^{(k)}$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Biểu diễn dưới dạng ma trận:

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2}\alpha^T G\alpha - e^T\alpha \right)$$

Với các ràng buộc:

$$I\alpha \geq 0$$

I: là ma trận đơn vị

$$y^T\alpha = 0$$

Nếu có lỗi thì thêm: $I\alpha \leq c$

với G là ma trận có các phần tử

$$G_{ij} = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} y^{(i)}y^{(j)}\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right)$$

$$G = (DX)(DX)^T = D(XX^T)D$$

X: là ma trận dữ liệu huấn luyện

D: ma trận đường chéo, chứa các $y^{(i)}$.

e: véc-tơ chứa toàn số 1.

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

Bài toán QP trong quadprog

$$\frac{1}{2}x^T G x - a^T x$$

$$C^T x \geq b$$

Nếu có ràng buộc "=" ta để trên,

ràng buộc ">=" ở dưới và gán

meq = số ràng buộc "="

SVM đối ngẫu (không lỗi):

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2}\alpha^T G \alpha - e^T \alpha \right)$$

các ràng buộc:

$$y^T \alpha = 0$$

$$I\alpha \geq 0$$

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

Giả sử, ta có tập huấn luyện:

x1	x2	y
2	2	+1
3	1	+1
1	1	-1

$$X = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad y = \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Hãy tính ma trận G !

$$G = (DX)(DX)^T = D(XX^T)D$$

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

Giả sử, ta có tập huấn luyện (không lỗi):

x1	x2	y
2	2	+1
3	1	+1
1	1	-1

```python
#Dữ liệu
X = np.matrix([[2.0, 2],
               [3, 1],
               [1, 1]])
y = np.array([1, 1, -1])


# Vẽ dữ liệu lên hệ trục toạ độ 0x1x2
plot.plot(X[0:2, 0], X[0:2, 1], 'bo')
plot.plot(X[2:3, 0], X[2:3, 1], 'rx')
plot.show()
```

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

```
# Xây dựng Ma trận G, a, C,
D = np.diag(y)
XXT = np.dot(X, X.T)                # Tính X.X^T
G = np.dot(np.dot(D, XXT), D)       # Tính D.X.X^T.D

a = np.array(3*[1.0])               # véc-tơ toàn số 1

I = np.diag(3*[1.0])                # Ràng buộc >= 0

C = np.vstack([y, I]).T             # Ghép ràng buộc = 0 và >= 0
b = np.array(4*[0.0])               # Vế phải ràng buộc

meq = 1                             # Có 1 ràng buộc bằng nhau
print(C.T)
```

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

```python
# Giải bài toán quy hoạch toàn phương dùng quadprog
sol = qp.solve_qp(G, a, C, b, meq)

alpha = sol[0]                          # Lấy các alpha

print('Alpha:', alpha)                  # Xem giá trị

#w = Sigma{alpha_i y^(i) x^(i)} # Tính w theo công thức, xem slides
w = sum(np.dot(np.diag(alpha), np.dot(D, X)), 0).T
print('w = ', w)                        # w có dạng 2x1
                                        # w1 = w[0,0], w2 = w[1,0]

```

Kết quả:
Alpha: [1.00000000e+00 6.66133815e-16 1.00000000e+00

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

```
k = np.argmax(alpha)                    #Tìm phần tử co alpha lớn nhất
print('xk =', X[k])

#bias
b = np.dot(X[k], w) - y[k]              # Tính b, b chỉ là 1 giá trị scalar
b = b[0,0]                              # Không phải véc-tơ hay ma trận.
print(b)
```

Kết quả:

w = [[1.]
 [1.]]

b = 3.0000000000000053

Giống với lời giải của bài toán gốc (sai số chút đỉnh là do sai số tính toán).

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

```
# Vẽ dữ liệu lên hệ trục toạ độ 0x1x2
plot.plot(X[0:2, 0], X[0:2, 1], 'bo')
plot.plot(X[2:3, 0], X[2:3, 1], 'rx')

x1 = np.array([0, 3])                # x1 từ 1 đến 3
x2 = (b - w[0,0]*x1)/w[1,0]          # x2 tính theo phương trình
plot.plot(x1, x2)                    # w1x1 + w2x2 - b = 0

plot.show()
```

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

- Khi số phần tử lớn mà số chiều nhỏ, ma trận G thường có định thức bằng 0.
- Để tránh trường hợp này, hãy cộng thêm vào đường chéo của G 1 lượng epsilon đủ nhỏ, vd: 1e-10.

```
G = G + np.diag(3*[1e-10])        # Cộng thêm epsilon
                                  # để tránh ma trận có định thức = 0
```

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

Bài toán QP trong quadprog

$$\frac{1}{2}x^T G x - a^T x$$

$$C^T x \geq b$$

Nếu có ràng buộc "=" ta để trên,

ràng buộc ">=" ở dưới và gán

meq = số ràng buộc "="

SVM đối ngẫu (có lỗi):

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2}\alpha^T G \alpha - e^T \alpha \right)$$

các ràng buộc:

$$y^T \alpha = 0$$

$$I\alpha \geq 0$$

$$\boxed{\begin{aligned} I\alpha &\leq c \\ \Leftrightarrow \quad -I\alpha &\geq -c \end{aligned}}$$

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

```
# Xây dựng Ma trận G, a, C,
c = 10                          # Hằng số du
D = np.diag(y)
XXT = np.dot(X, X.T)            # Tính X.X^T
G = np.dot(np.dot(D, XXT), D)   # Tính D.X.X^T.D
G = 0.5*(G + G.T)

G = G + np.diag(m*[1e-10])      # Trán trườ ợp |G| = 0

a = np.array(m*[1.0])                  # c-tơ toàn số 1

I = np.diag(m*[1.0])                   # Ràng buộc >= 0
C = np.vstack([y, I, -I]).T            # Ghép ràng buộc = 0 và >= 0

b = np.array([0.0] + m*[0.0] + m*[-c]) # Vế phải ràng buộc
```

Bổ sung thêm m ràng buộc.
Các phần còn lại giữ nguyên.

Cài đặt bài toán đối ngẫu với thư viện quadprog

Hãy viết chương trình huấn luyện mô hình với tập dữ liệu bên dưới (có lỗi).

x1	x2	y
2	2	+1
3	1	+1
1	1	-1
2.5	1.4	-1

Báo cáo kết quả thu được với c = 10, 100, 1000.

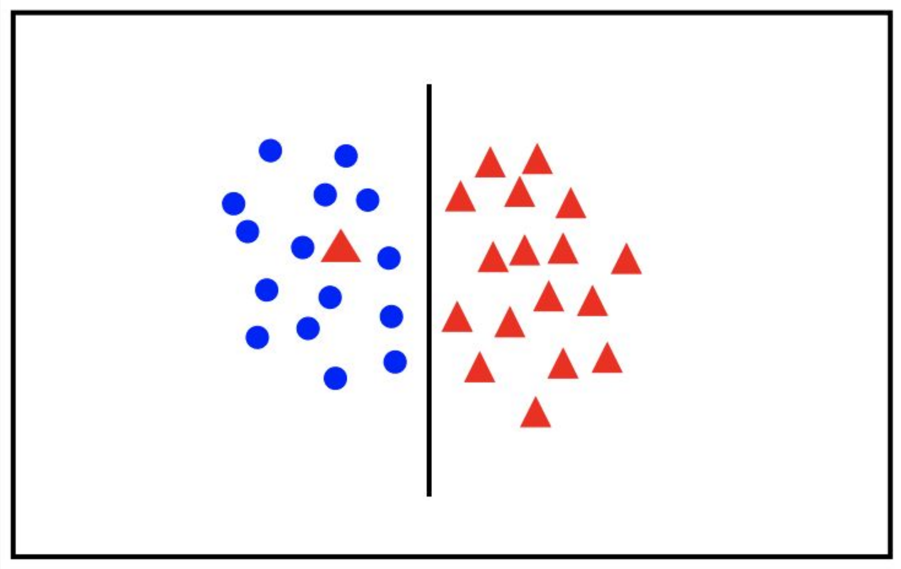
So sánh với kết quả thu được so với bài toán gốc.

Tại sao phải giải bài toán đối ngẫu ?

- Độ lớn bài toán:
  - Bài toán gốc có $n+1$ biến (trường hợp khả tách) và $n + 1 + m$ (trường hợp không khả tách)
  - Bài toán đối ngẫu có m biến (cho cả 2 trường hợp)
  - Khi $m << n$ thì bài toán đối ngẫu giải nhanh hơn.

- Tuy nhiên, nguyên nhân quan trọng hơn vẫn là **Kernel trick** !

Xử lý dữ liệu phi tuyến



Sử dụng mô hình tuyến tính, chấp nhận 1 số lỗi, bổ sung thêm biến z.

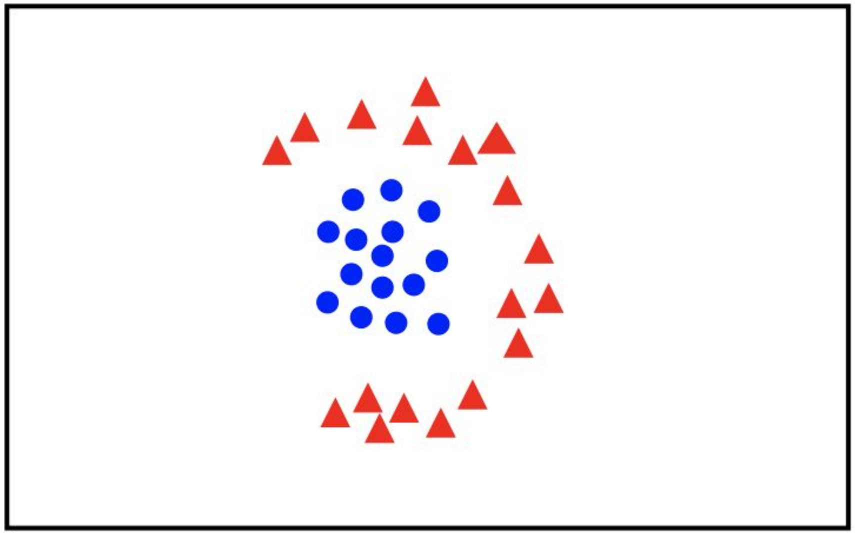
$$\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_i z^{(i)}$$

Ràng buộc

$$y^{(i)}\left(w_1 x_1^{(i)} + w_2 x_2^{(i)} - b\right) + z^{(i)} \geq +1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

Xử lý dữ liệu phi tuyến



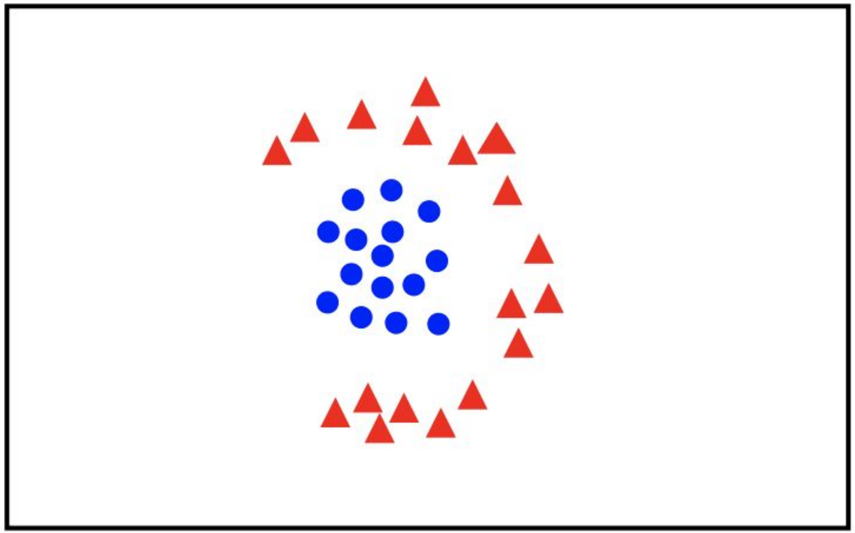
Ca này coi bộ khó.

Không thể dùng mô hình tuyến tính (đường thẳng) để phân tách dữ liệu này !

Giải pháp ?

Dừng lại chút và suy nghĩ chút !

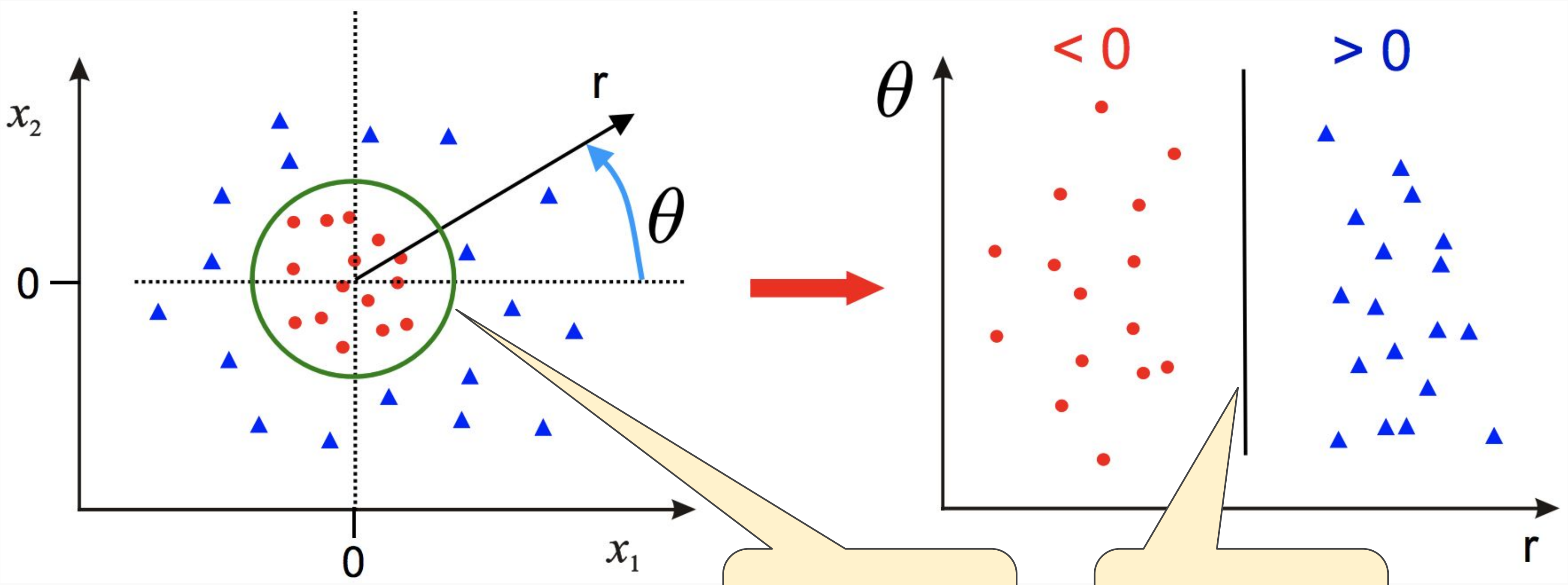
Xử lý dữ liệu phi tuyến



Thay đổi/biến đổi đặc trưng !

Nhìn dữ liệu với góc nhìn (hoặc đơn vị tính) khác.

Xử lý dữ liệu phi tuyến

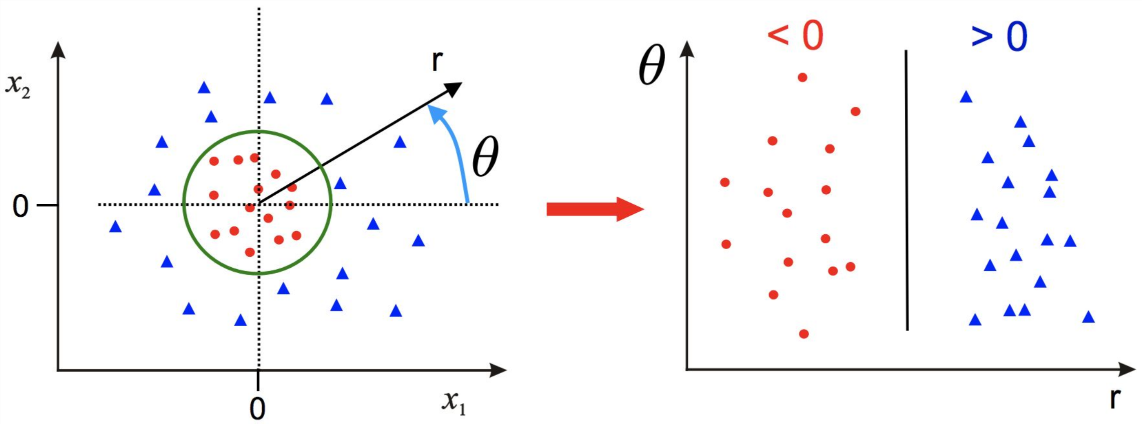


Đường cong (**phi tuyến**)

Đường thẳng (**tuyến tính**)

- **P/án 1: chuyển về toạ độ cực**
- Đặc trưng mới bây giờ là r và theta !!!

Xử lý dữ liệu phi tuyến



Công thức biến đổi:

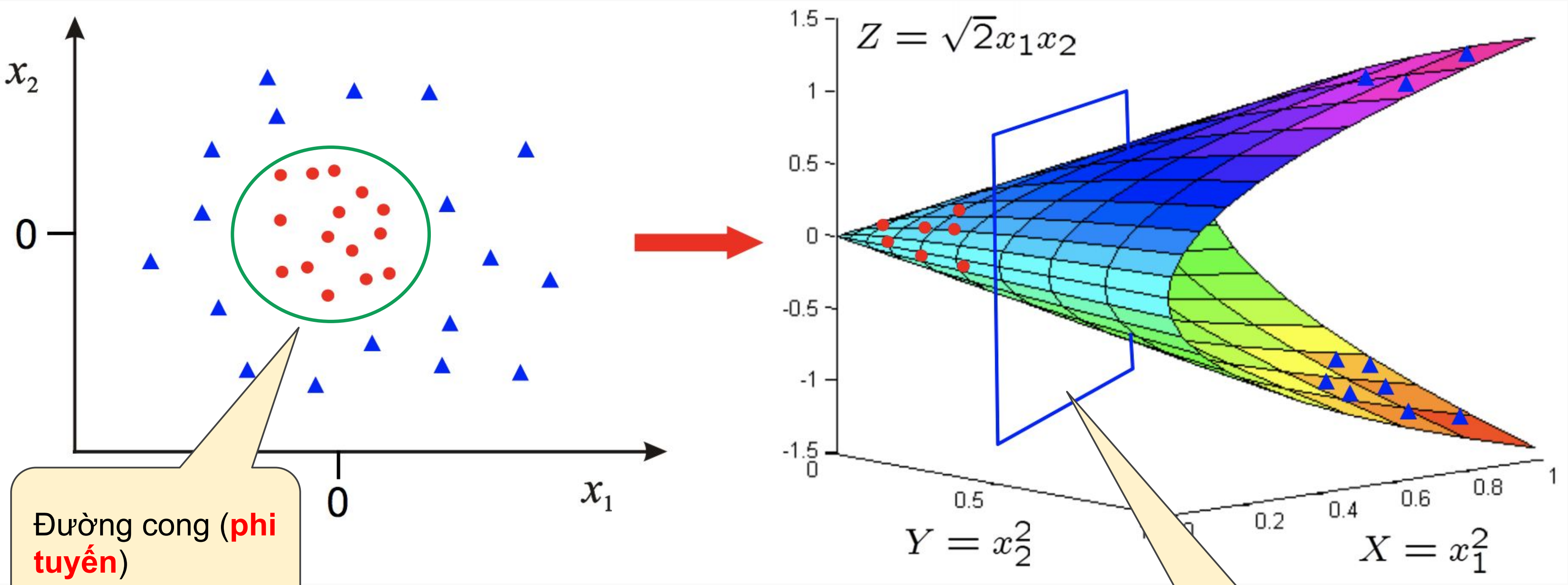
$$r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2}$$

$$\theta = tan^{-1}\left(\frac{x_2}{x_1}\right)$$

Ánh xạ phi tuyến:

$$\Phi : \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} r \\ \theta \end{pmatrix} \qquad \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$$

- **Chuyển về toạ độ cực**
- Đặc trưng mới bây giờ là r và theta !!!

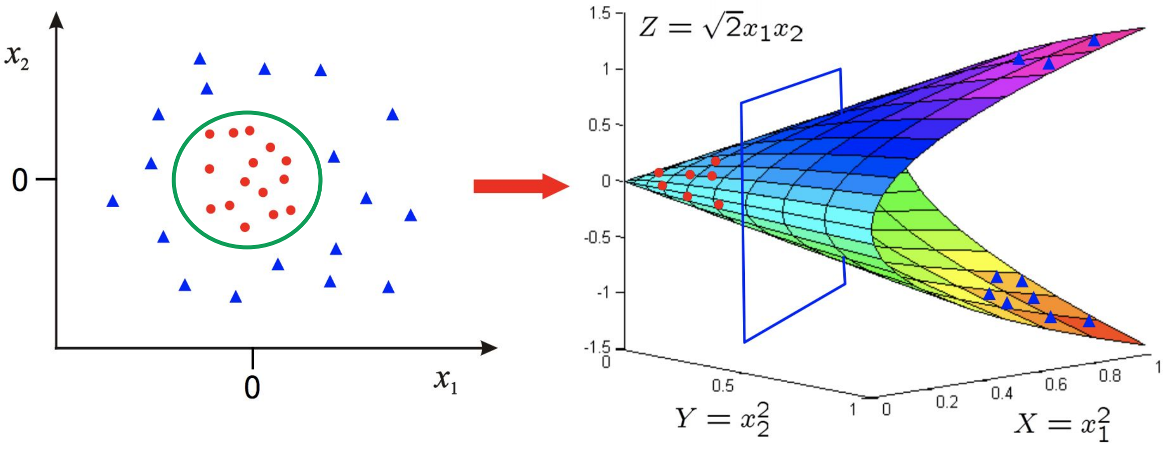


Đường cong (**phi tuyến**)

Mặt phẳng (**tuyến tính**)

- **P/án 2: Biểu diễn sang không gian có số chiều lớn hơn**
- Đặc trưng mới bây giờ là X, Y và Z !!!

Xử lý dữ liệu phi tuyến



Công thức biến đổi:

$$X = x_1^2$$
$$Y = x_2^2$$
$$Z = \sqrt{2}x_1x_2$$

Ánh xạ phi tuyến:

$$\Phi : \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} x_1^2 \\ x_2^2 \\ \sqrt{2}x_1x_2 \end{pmatrix} \qquad \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$$

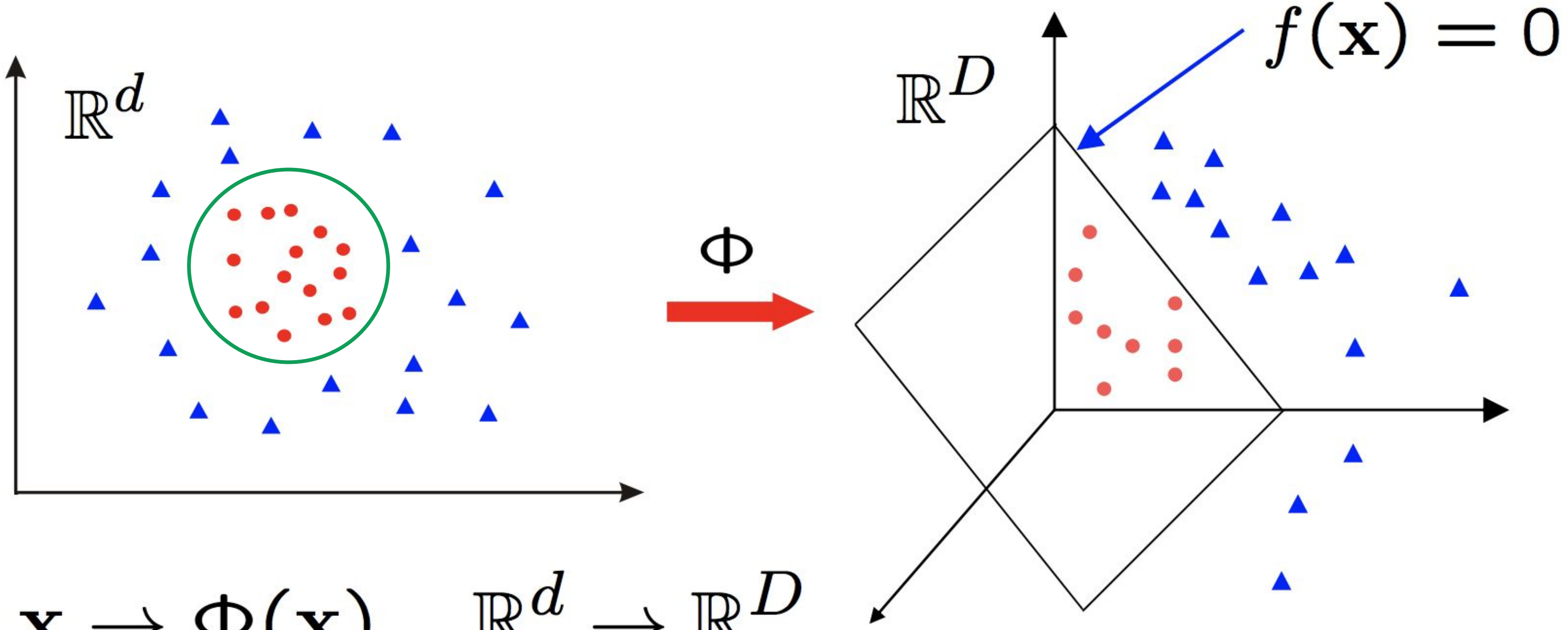
- **Biểu diễn sang không gian có số chiều lớn hơn**
- Đặc trưng mới bây giờ là X, Y và Z !!!

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Áp dụng mô hình SVM như thế nào trong trường hợp dữ liệu phi tuyến (không thể tách được bằng mô hình tuyến tính) ?

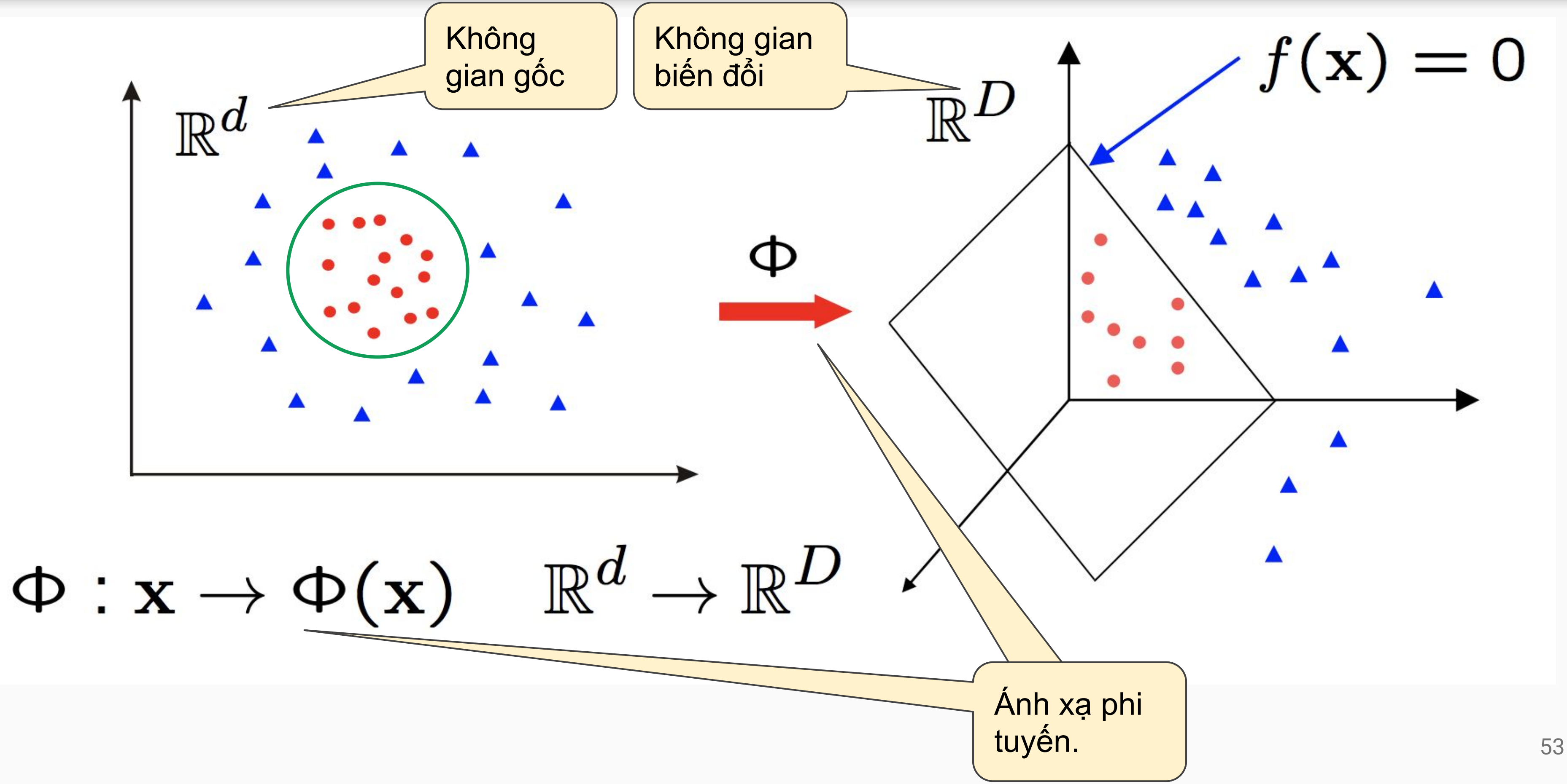
- Biến đổi dữ liệu sang không gian mới (dùng ánh xạ Φ).
- Trong không gian mới dữ liệu trở nên khả tách tuyến tính, áp dụng SVM tuyến tính lên dữ liệu mới.

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

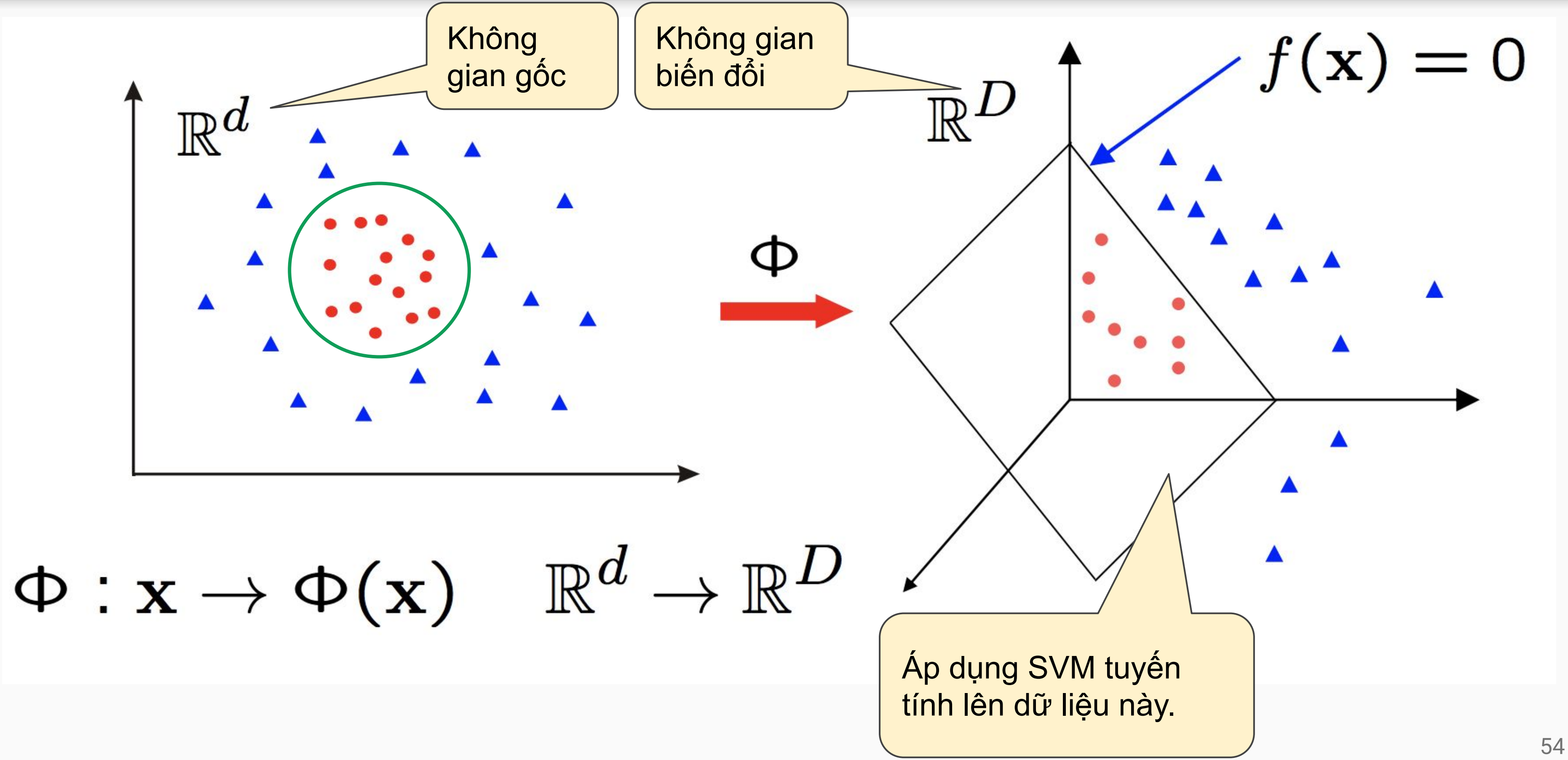


$\Phi : \mathbf{x} \to \Phi(\mathbf{x}) \quad \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^D$

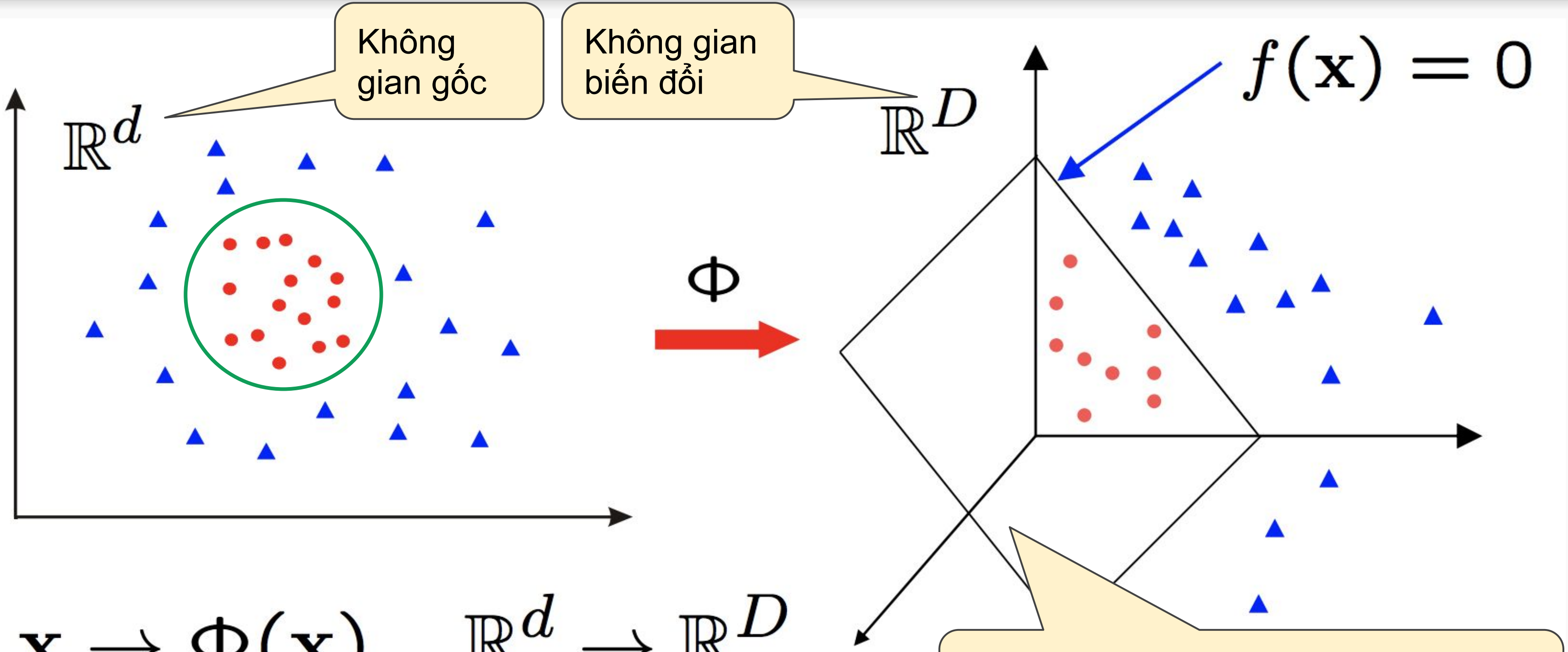
Sử dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi



Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi



Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi



$$\Phi : \mathbf{x} \rightarrow \Phi(\mathbf{x}) \qquad \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^D$$

Phương trình mặt phẳng phân lớp:

$$f(x) = w^T \Phi(x) - b = 0$$

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

SVM tuyến tính trong không gian gốc (SVM gốc):

$$\min_{(w,b,z)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \right)$$

Ràng buộc:

$$y^{(i)} \left(w_1 x_1^{(i)} + w_2 x_2^{(i)} + \ldots - b \right) + z^{(i)} \geq 1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

SVM tuyến tính trong không gian biến đổi:

$$\min_{(w,b,z)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \right)$$

Ràng buộc:

$$y^{(i)} \left(w_1 \Phi\left(x^{(i)}\right)_1 + w_2 \Phi\left(x^{(i)}\right)_2 + \ldots - b \right) + z^{(i)} \geq 1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

Áp dụng SVM gốc lên dữ liệu trong không gian mới.

x được thay bằng ϕ(x)

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

SVM tuyến tính trong không gian gốc (SVM gốc):

$$\min_{(w,b,z)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \right)$$

Ràng buộc:

$$y^{(i)}\left(w_1 x_1^{(i)} + w_2 x_2^{(i)} + \ldots - b\right) + z^{(i)} \geq 1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

SVM tuyến tính trong không gian biến đổi:

$$\min_{(w,b,z)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \right)$$

Ràng buộc:

$$y^{(i)}\left(w_1 \Phi\left(x^{(i)}\right)_1 + w_2 \Phi\left(x^{(i)}\right)_2 + \ldots - b\right) + z^{(i)} \geq 1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

Kết quả:

- **SVM tuyến tính trong không gian biến đổi** tương đương với **SVM "phi tuyến" trong không gian gốc**.

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Điều kiện áp dụng SVM “phi tuyến”:

- Phải định nghĩa **ánh xạ/hàm biến đổi đặc trưng** (feature map) **ϕ**
- Biến đổi tường minh dữ liệu gốc sang không gian mới

Khó khăn:

- Định nghĩa ϕ không phải lúc nào cũng dễ (vì có biết dữ liệu thế nào đâu)!
- Dữ liệu trong không gian mới có thể có số chiều rất lớn => tốn bộ nhớ, chạy lâu.

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

SVM tuyến tính trong không gian gốc (đối ngẫu):

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(x^{(i)}\cdot x^{(j)}\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

SVM tuyến tính trong không gian biến đổi:

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(\Phi\left(x^{(i)}\right)\cdot\Phi\left(x^{(j)}\right)\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

Áp dụng SVM đối ngẫu lên dữ liệu trong không gian mới.

x cũng được thay bằng ϕ(x).

Vậy có gì hay (so với SVM gốc)?

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

SVM tuyến tính trong không gian gốc (đối ngẫu):

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(x^{(i)}\cdot x^{(j)}\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

SVM tuyến tính trong không gian biến đổi:

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(\Phi\left(x^{(i)}\right)\cdot\Phi\left(x^{(j)}\right)\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

Hay chứ !

- Nếu đặt: $K\left(x^{(i)},x^{(j)}\right)=\left(\Phi\left(x^{(i)}\right)\cdot\Phi\left(x^{(j)}\right)\right)$

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Bài toán trở thành:

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} K\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right) - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

Kết quả:

- **Bài toán không còn phụ thuộc vào ϕ nữa mà chỉ cần K.**
- **K được gọi là hàm nhân (Kernel function)**

Việc áp dụng hàm nhân vào trong bài toán gọi là Kernel trick !

Tuy nhiên, không phải bài toán nào cũng xài Kernel trick được. Hãy xem lại bài toán SVM gốc (primal) để biết tại ta không thể xài kernel ?

K thì có gì hay hơn ϕ ?

- $K(x^{(i)}, x^{(j)})$ cho kết quả là 1 con số (scalar), $\phi(x)$ trả về 1 véc-tơ có số chiều lớn.
- Tính K trực tiếp từ $x^{(i)}, x^{(j)}$ sẽ nhanh hơn nhiều so với việc biến đổi rồi tính tích vô hướng. Hơn nữa, định nghĩa ϕ sẽ khó hơn định nghĩa K.
- Về mặt ý nghĩa:
  - $K(x^{(i)}, x^{(j)})$ cho biết sự **tương tự** giữa $x^{(i)}$ và $x^{(j)}$. Tích vô hướng là một trong các độ đo tương tự có thể dùng. Nếu sử dụng tích vô hướng làm K thì ta sẽ có **kernel tuyến tính** !
  - Khi sử dụng kernel (không tuyến tính), bạn có thể bẻ cong không gian và **đường cong trong mắt bạn lại là đường thẳng trong mắt của Kernel !**

K thì có gì hay hơn ϕ ?

- Một số kernel K thông dụng:
  - Tuyến tính:

$$K(u,v) = (u \cdot v) = u^T v$$

  - Đa thức:

$$K(u,v) = (\gamma u^T v + r)^d$$

  - RBF:

$$K(u,v) = e^{-\gamma |u-v|^2}$$

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Giải bài toán đối ngẫu ta sẽ tìm được các α_i. Các phần tử $\mathbf{x}^{(i)}$ có $\alpha_i > 0$ tương ứng là véc-tơ hỗ trợ.

Tham số w được tính dựa trên các **véc-tơ hỗ trợ**.

$$w = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} \Phi\left(x^{(i)}\right)$$

Tuy nhiên, ta sẽ không tính trực tiếp w đâu mà để đó chờ :-) vì muốn tính cũng không có **ϕ** đâu để mà tính.

Để tính độ lệch (bias) b, chọn 1 **véc-tơ hỗ trợ k** bất kỳ có $\alpha_i < c$:

$$b = w^T \Phi\left(x^{(k)}\right) - y^{(k)}$$

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Áp dụng Kernel trick cho b:

$$
\begin{aligned}
b = & \; w^T \Phi\left(x^{(k)}\right) - y^{(k)} \\
= & \sum_{i=1}^{m} \left[\alpha_i y^{(i)} \left(\Phi\left(x^{(i)}\right) \cdot \Phi\left(x^{(k)}\right)\right)\right] - y^{(k)} \\
= & \sum_{i=1}^{m} \left[\alpha_i y^{(i)} K\left(x^{(i)}, x^{(k)}\right)\right] - y^{(k)}
\end{aligned}
$$

Áp dụng SVM trong không gian đặc trưng đã được biến đổi

Dự báo nhãn cho phần tử mới x:

$$
\begin{aligned}
f(x) &= w^T \Phi(x) - b \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[\alpha_i y^{(i)} \left(\Phi\left(x^{(i)}\right) \cdot \Phi(x) \right) \right] - b \\
&= \sum_{i=1}^{m} \left[\alpha_i y^{(i)} K\left(x^{(i)}, x\right) \right] - b
\end{aligned}
$$

Nếu *f*(*x*) > 0 => x thuộc lớp dương, ngược lại x thuộc lớp âm.

Dừng lại chút và cài đặt thôi !

Cài đặt SVM với hàm nhân

Hàm mục tiêu:

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}K\left(x^{(i)},x^{(j)}\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Ràng buộc:

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0 \qquad \alpha_i \leq c$$

Viết dưới dạng ma trận:

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\alpha^T G\alpha - e^T\alpha_i\right)$$

$$G = DKD$$

Cài đặt SVM với hàm nhân

Hàm mục tiêu:

$$\min_{\alpha} \left(\frac{1}{2} \alpha^T G \alpha - e^T \alpha_i \right)$$

Các ràng buộc:

$$y^T \alpha = 0$$

$$I\alpha \geq 0$$

$$-I\alpha \geq -c$$

$$G = DKD$$

Trong đó:

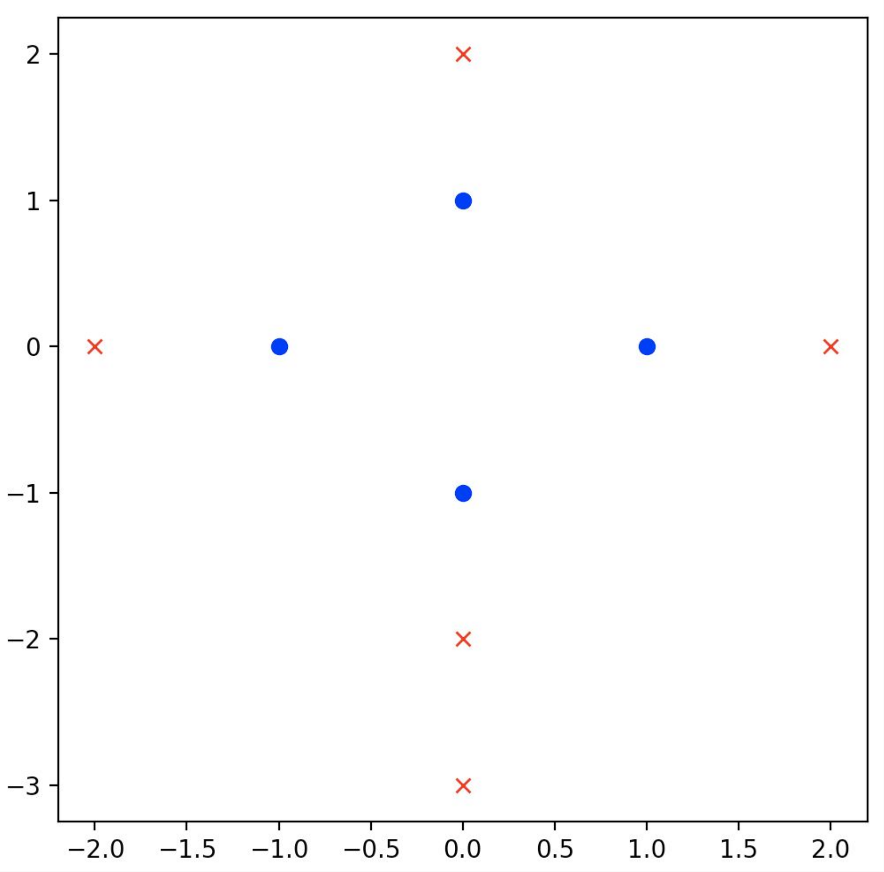
- e: véc-tơ chứa toàn số 1
- D: ma trận đường chéo chứa nhãn/lớp (y) của các phần tử
- K: ma trận m x m

$$K_{ij} = Kernel\left(x^{(i)}, x^{(j)}\right)$$

Cài đặt SVM với hàm nhân với thư viện quadprog

Hãy viết chương trình huấn luyện mô hình với tập dữ liệu bên dưới (có lỗi).

x1	x2	y
1	0	+1
0	1	+1
-1	0	+1
0	-1	+1
2	0	-1
0	2	-1
-2	0	-1
0	-2	-1
0	-3	-1



Cài đặt SVM với hàm nhân với thư viện quadprog

Cài đặt các hàm kernel

```
def linear_kernel(xi, xj, gama = 0.0):
    return np.dot(xi, xj.T)[0, 0]


def polyminal_kernel(xi, xj, gama = 1.0, d = 2.0, r = 0.0):
    return (gama*np.dot(xi, xj.T)[0, 0] + r)**d


def RBF_kernel(xi, xj, gama = 1.0):
    diff = xi - xj
    dist = np.dot(diff, diff.T)[0, 0]
    return np.exp(-gama*dist)

kernel = polyminal_kernel
```

Homework

Bài tập (hạn cuối: 23h59 thứ 6 ngày 2/4/2021)

- Xem thông báo trên Google classroom

Tham khảo

Vẽ đồ thị với Matplot: https://matplotlib.org/tutorials/introductory/pyplot.html

Thư viện Quadprog: https://pypi.org/project/quadprog/

PHỤ LỤC
SVM đối ngẫu trường hợp không khả tách

Trường hợp không khả tách tuyến tính (có phần tử lỗi), ta có bài toán gốc:

$$\min_{(w,b)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c \sum_{i=1}^{m} z^{(i)} \right)$$

Với các ràng buộc:

$$y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b \right) + z^{(i)} \geq 1$$

$$z^{(i)} \geq 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Bài toán đối ngẫu sẽ là:

$$\max_{(\alpha,\mu)} \min_{(w,b,z)} \left(\frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b \right) - z^{(i)} \right] - \sum_{i=1}^{m} \mu_i z^{(i)} \right)$$

Với các ràng buộc:

$$\alpha_i \geq 0$$

$$\mu_i \geq 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Đặt:

$$f(w,b,z) = \frac{1}{2}|w|^2 + c\sum_{i=1}^{m} z^{(i)} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)}\left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right) - z^{(i)}\right] - \sum_{i=1}^{m} \mu_i z^{(i)}$$

$$= \frac{1}{2}|w|^2 + \sum_{i=1}^{m} (c - \alpha_i - \mu_i) z^{(i)} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)}\left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right]$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Tính các đạo hàm riêng:

$$\frac{\partial f}{\partial w} = w - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)}$$

$$\frac{\partial f}{\partial z_i} = c - \alpha_i - \mu_i$$

Hệ phương trình đạo hàm riêng = 0

$$w - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$c - \alpha_i - \mu_i = 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Thay các hệ phương trình vào f:

$$w - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} x^{(i)} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$c - \alpha_i - \mu_i = 0$$

- Tổng này = 0
- Tổng hai số hạng còn lại có kết quả giống như trường hợp khả tách tuyến tính.

$$f(w, b, z) = \frac{1}{2}|w|^2 + \boxed{\sum_{i=1}^{m} (c - \alpha_i - \mu_i) z^{(i)}} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \left[1 - y^{(i)} \left(x_1^{(i)} w_1 + x_2^{(i)} w_2 + \ldots - b\right)\right]$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Thế vào bài toán Max:

$$\max_{(\alpha,\mu)} \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(i)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right) \right)$$

Với các ràng buộc

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$\alpha_i \geq 0$$

$$\mu_i \geq 0$$

$$c - \alpha_i - \mu_i = 0$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Thế vào bài toán Max:

$$\max_{(\alpha,\mu)} \left(\sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y^{(i)} y^{(j)} \left(x^{(i)} \cdot x^{(j)} \right) \right)$$

Với các ràng buộc

$$\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y^{(i)} = 0$$

$$\alpha_i \geq 0$$

$$\boxed{\begin{gathered} \mu_i \geq 0 \\ c - \alpha_i - \mu_i = 0 \end{gathered}} \Longrightarrow \alpha_i \leq c$$

Bài toán đối ngẫu của SVM

Thế vào bài toán Max:

$$\min_{\alpha}\left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\alpha_i\alpha_j y^{(i)}y^{(j)}\left(x^{(i)}\cdot x^{(j)}\right)-\sum_{i=1}^{m}\alpha_i\right)$$

Với các ràng buộc

$$\sum_{i=1}^{m}\alpha_i y^{(i)}=0$$

$$\alpha_i \geq 0$$

$$\boxed{\begin{gathered}\mu_i \geq 0\\ c-\alpha_i-\mu_i=0\end{gathered}} \Rightarrow \alpha_i \leq c$$

- Bỏ luôn biến μ
- Đổi dấu, chuyển max thành min.