Support Vector Machine

Jeonghun Yoon

Concepts

Decision Hyperplane

조건부 최적화 문제

- Affine set / function
- Convex set / function
- Convex optimization
- Lagrangian / Dual problem / Wolfe duality
- KKT conditions

Soft / Hard margin SVM

Kernel Function

Classification분류

Supervised Learning

Given samples $X = ((\mathbb{x}_1, y_1), (\mathbb{x}_2, y_2), \dots, (\mathbb{x}_N, y_N))$

$\downarrow$

find! $f : \mathbb{X} \to Y$

Demo

http://cs.stanford.edu/people/karpathy/svmjs/demo/

Think about

Question 1) 좋은 분류기(classifier)란?

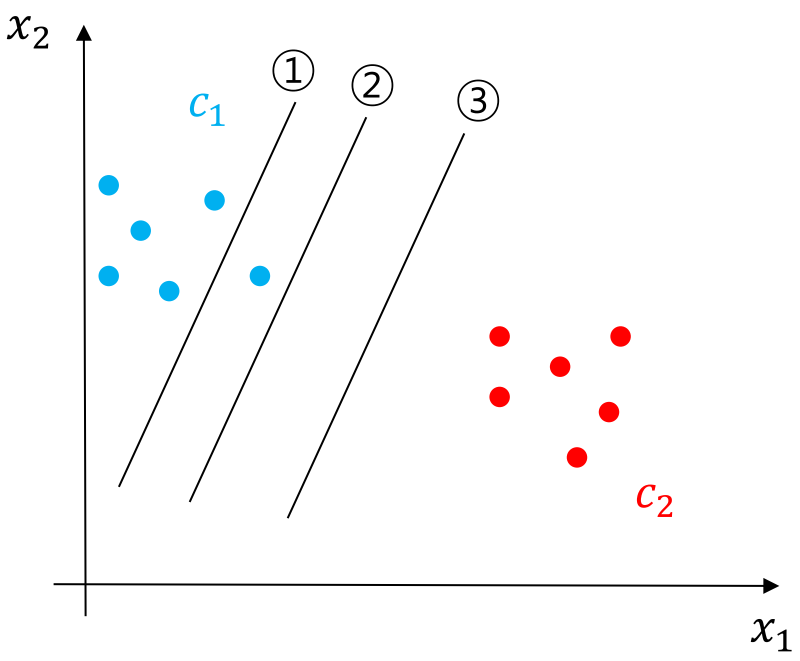
Question 2) 분류기의 분류 기준은?

- Bayesian Classifier : Error, Risk를 minimize

  (Likelihood or MAP 분포에서의 오류영역)

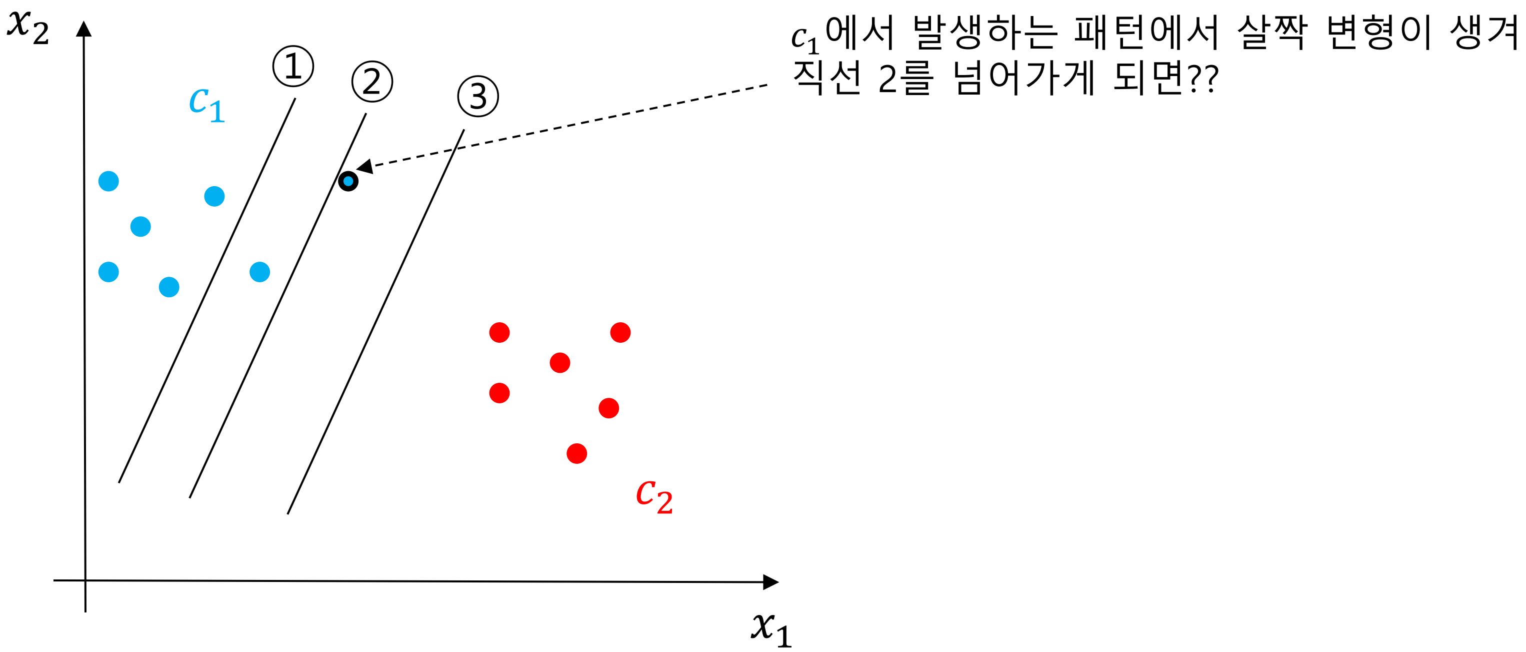
Classifier의 기준

1. 데이터는 2차원 공간의 point라고 가정 : feature가 2개
2. 하늘색 point ∈ c_1, 빨간색 point ∈ c_2 라고 가정



어떤 분류 직선을 선택하겠는가?

Classifier의 기준



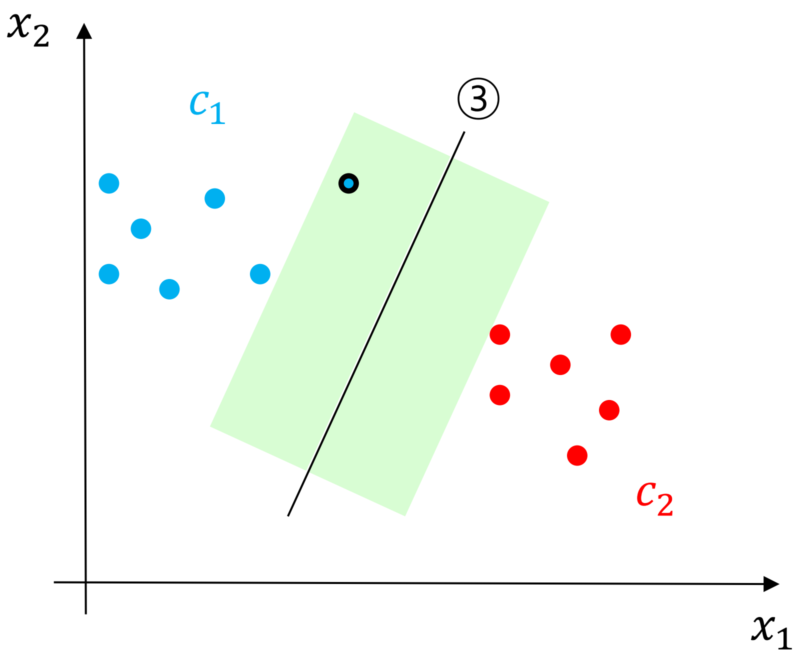
분류 직선을 선택함에 있어서, 중요하게 고려되어야 할 요소 : **Generalization**

(미래에 발생할 미지의 패턴을 얼마나 잘 분류하는가?)

Classifier의 기준

Generalization을 극대화

(패턴에서 어느정도의 변형이 발생해도 오분류 되지 않도록 한다.)



부류 사이에 여유를 두자. 즉 여백(margin)을 크게 만들고, 반으로 나누자.

Decision Hyperplane결정 초평면

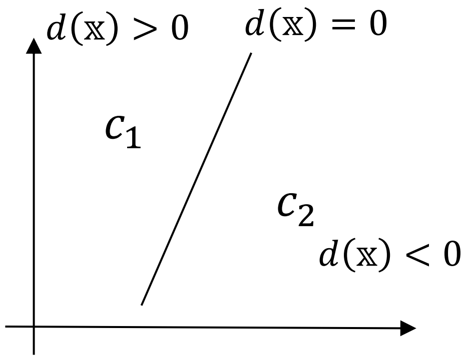
$\mathbb{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n, \ \mathbb{w} = (w_1, w_2, \ldots, w_n) \in \mathbb{R}^n, \ b \in \mathbb{R}$

결정 초평면 (decision hyperplane)

$$d(\mathbb{x}) = \mathbb{w}^T \mathbb{x} + b = 0$$

$d(\mathbb{x})$은 특징 공간을 두 영역으로 분할한다.

- c_1은 $d(\mathbb{x}) > 0$인 영역
- c_2은 $d(\mathbb{x}) < 0$인 영역



하나의 초평면을 표현하는 식은 여럿 있다.

$\mathbb{w}$: normal vector(초평면의 방향), b : 초평면의 위치

임의의 점 $\mathbb{x}_1$에서 초평면까지의 거리 : $\boldsymbol{h = \frac{d(\mathbb{x}_1)}{|\mathbb{w}|}}$

조건부 최적화 문제

Constrained optimization problem (primal problem)

minimize	$f_0(\mathbb{x})$
subject to	$f_i(\mathbb{x}) \le 0\ ,\ i = 1, \dots, m$
	$h_i(\mathbb{x}) = 0\ ,\ i = 1, \dots, p$

- $\mathbb{x} \in \mathbb{R}^n$ is the optimization variable.
- $f_0 : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ is the objective function or cost function. (목적 함수)
- $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ i = 1, \dots, m$, are inequality constraint functions.
- $h_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R},\ i = 1, \dots, p$, are equality constraint functions.
- Optimal value $p^\star$

$$p^\star = \inf\{f_0(\mathbb{x}) \mid f_i(\mathbb{x}) \le 0, i = 1, \dots, m, h_i(\mathbb{x}) = 0, i = 1, \dots, p\}$$

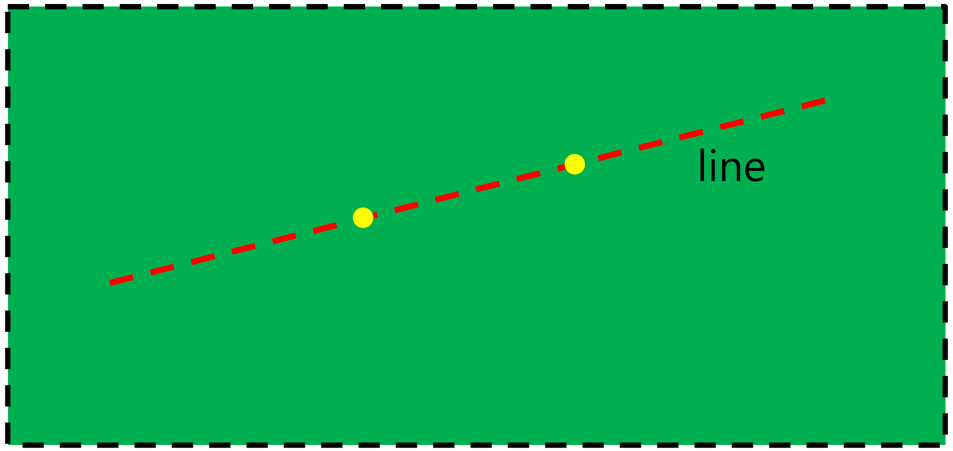
Affine / Convex

Affine set

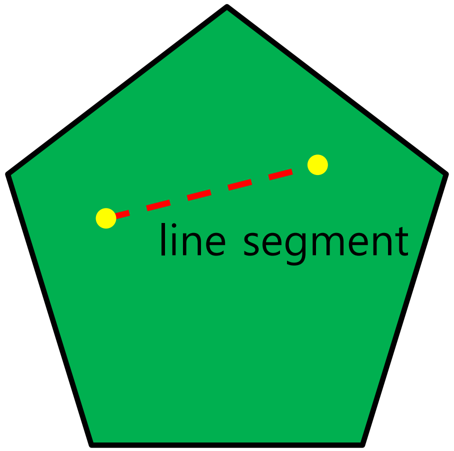
- $C \subset \mathbb{R}^n$ is **affine** → C 안의 2개의 서로 다른 point를 지나는 line이 C에 속할 때.
- 쉬운 예로, 평면 or hyperplane 등이 있다.

Convex set

- $C \subset \mathbb{R}^n$ is **convex** → C 안의 2개의 서로 다른 point를 지나는 line segment가 C에 속할 때.
- 쉬운 예로, 원 or 오각형 등이 있다.



Affine set (평면)



convex set (오각형)

Affine function

Affine function

- a function composed of a linear function and constant (translation)
- in 1-dim : $y = Ax + C$
- in 2-dim : $f(x, y) = Ax + By + C$
- in 3-dim : $f(x, y, z) = Ax + By + Cz + D$

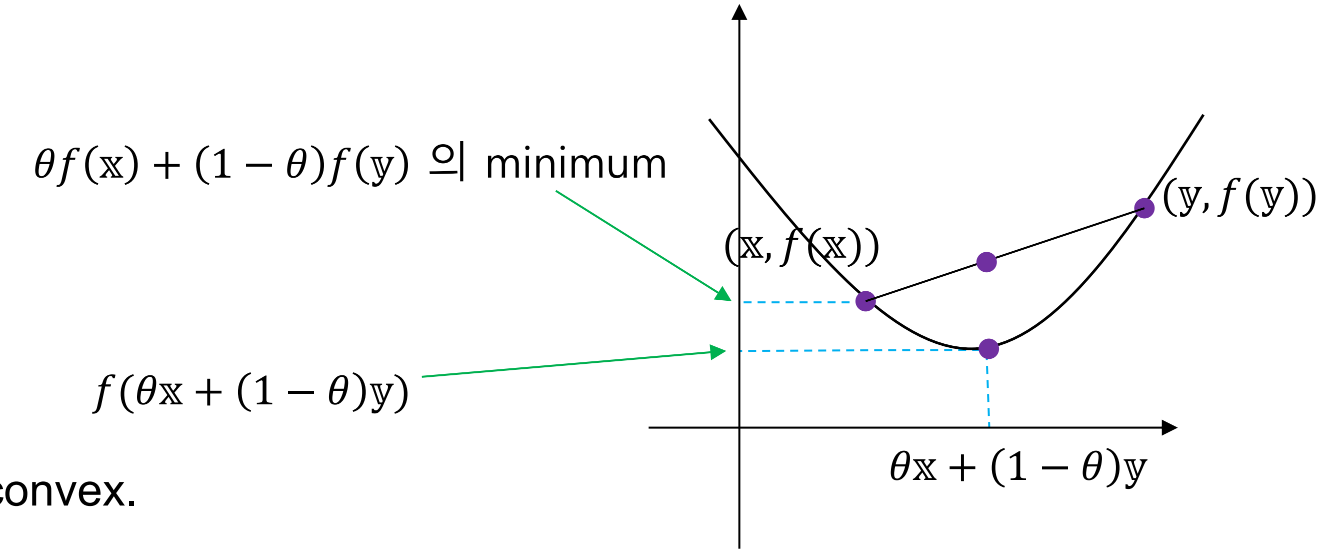
Translation : a transformation consisting of a constant offset with no rotation or distortion

Convex function

$f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ is convex if $\mathbf{dom}\, f$ is convex and

$$f(\theta \mathbb{x} + (1-\theta)\mathbb{y}) \leq \theta f(\mathbb{x}) + (1-\theta) f(\mathbb{y})$$

for $\forall \mathbb{x}, \mathbb{y} \in \mathbf{dom}\, f$, $0 \leq \theta \leq 1$.



f is concave if $-f$ is convex.

$\mathbf{dom}\, f$: 함수 f의 유효한 입력 값의 집합. 이 영역을 f가 define되는 영역이라고도 표현 한다.

Convex optimization

convex optimization problem

$$\begin{aligned} &\text{minimize} && f_0(\mathbb{x}) \\ &\text{subject to} && f_i(\mathbb{x}) \le 0 \ , \ i = 1, \dots, m \\ & && \mathbb{a}_i^T \mathbb{x} = b_i \ , \ i = 1, \dots, p \end{aligned}$$

- $f_0, \dots, f_m$ are convex.
- $h_i(\mathbb{x}) = \mathbb{a}_i^T \mathbb{x} - b_i$, $i = 1, \dots, p$ are affine.
- The feasible set of a convex optimization problem is convex.
  - Since $f_1, \dots, f_m$ are convex, $\bigcap_{i=1}^{m} \mathbf{dom}\ f_i$ is convex.
  - Since $\{\mathbb{x} \mid \mathbb{a}_i \mathbb{x} = b_i\}$ is hyperplane, $\bigcap_{i=1}^{p} \{\mathbb{x} \mid \mathbb{a}_i \mathbb{x} = b_i\}$ is affine (i.e convex).
- In a convex optimization, *we minimize a convex objective function over a convex set.*

Lagrangian

Lagrangian $\mathcal{L}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$,

$$\mathcal{L}(\mathbb{x}, \Lambda, V) = f_o(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i h_i(\mathbb{x})$$

with, $\mathbf{dom}\, \mathcal{L} = (\cap_{i=1}^{m} \mathbf{dom}\, f_i) \cap \left(\cap_{i=1}^{p} \mathbf{dom}\, h_i\right) \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p$

- λ_i is **Lagrange multiplier** associated with $f_i(\mathbb{x}) \leq 0$ and $\boldsymbol{\Lambda} = (\boldsymbol{\lambda_1}, \dots, \boldsymbol{\lambda_m})$
- v_i is **Lagrange multiplier** associated with $h_i(\mathbb{x}) = 0$ and $V = (\boldsymbol{v_1}, \dots, \boldsymbol{v_p})$

Lagrange dual function / Lagrange dual problem

Lagrange dual function $g: \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$

$$g(\Lambda, V) = \inf_{\mathbb{x} \in \mathcal{D}} \mathcal{L}(\mathbb{x}, \Lambda, V) = \inf_{\mathbb{x} \in \mathcal{D}} \left(f_0(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i h_i(\mathbb{x}) \right)$$

Lagrange dual problem

maximize	$g(\Lambda, V)$
subject to	$\Lambda \succcurlyeq 0$

- $g(\Lambda, V)$ is concave and constraints are convex, so this is convex optimization problem.
- Lagrange dual problem의 해$(\Lambda^\star, V^\star)$는 primal problem$(\mathbb{x}^\star)$ 해의 lower bound를 제공한다.

$$\inf \mathcal{L}(\mathbb{x}^\star, \Lambda^\star, V^\star) \leq f_0(\mathbb{x}^\star)$$

How to make it coincide?

KKT condition and zero duality

If

- f_i are convex (목적함수, inequality constraint)
- h_i are affine (equality constraint)
- $\mathbb{x}^\star, \Lambda^\star, V^\star$ satisfy KKT condition

Then

- $\mathbb{x}^\star$ is primal optimal and $(\Lambda^\star, V^\star)$ is dual optimal with zero duality gap.
- 두 개의 해가 같아진다.

KKT conditions

primal constraints $f_i(\mathbb{x}') \leq 0,\ i = 1, \dots, m$

$h_i(\mathbb{x}') = 0,\ i = 1, \dots, p$

dual constraints $\lambda_i' \geq 0,\ i = 1, \dots, m$

complementary slackness $\lambda_i' f_i(\mathbb{x}') = 0,\ i = 1, \dots, m$

gradient Lagrangian
with respect to $\mathbb{x}$ vanishes at $\mathbb{x}'$ $\nabla f_0(\mathbb{x}') + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i' \nabla f_i(\mathbb{x}') + \sum_{i=1}^{p} v_i' \nabla h_i(\mathbb{x}') = 0$

Wolfe duality

Wolfe duality problem

- f_0 is convex.
- f_i, g_i are differentiable. (Lagrange dual problem → Wolfe duality problem)

$$
\begin{array}{ll}
\text{maximize} & \underbrace{f_0(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i f_i(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i h_i(\mathbb{x})}_{\mathcal{L}(\mathbb{x}, \Lambda, V)} \\
\text{subject to} & \Lambda \succcurlyeq 0 \\
 & \nabla f_0(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i' \nabla f_i(\mathbb{x}) + \sum_{i=1}^{p} v_i' \nabla h_i(\mathbb{x}) = 0
\end{array}
$$

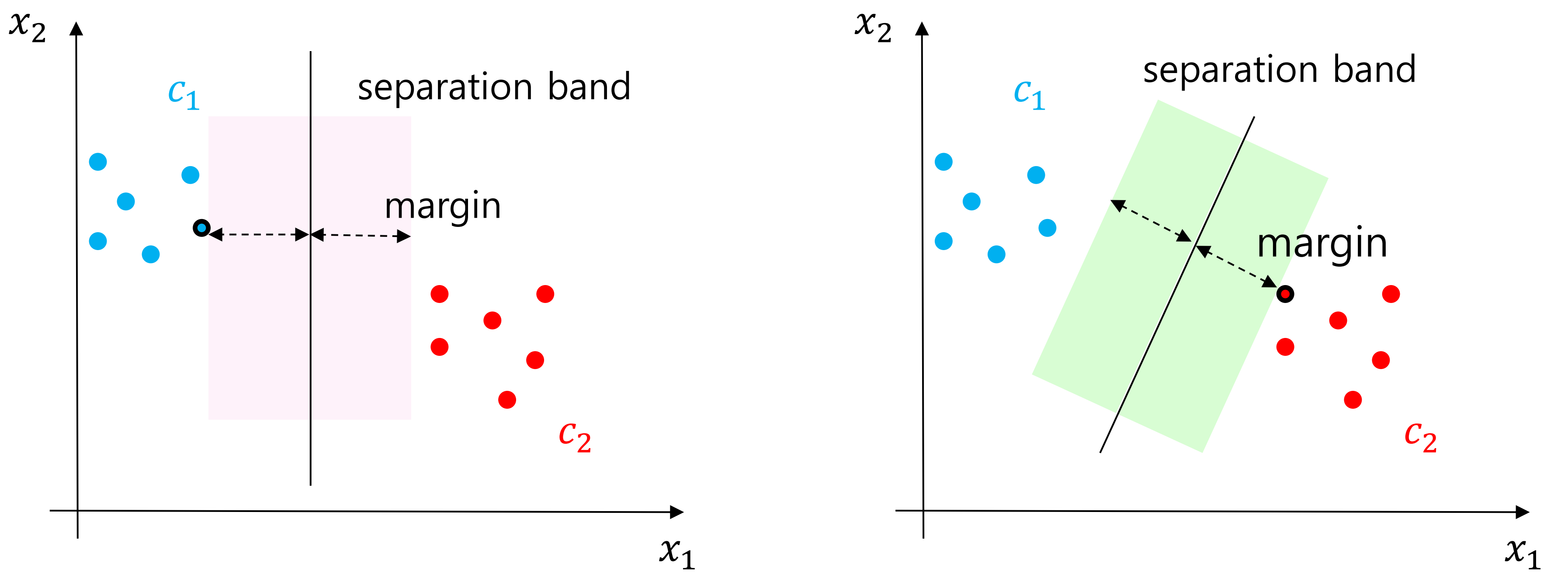
- 제약조건이 KKT conditions에 있는 조건들에 이미 포함되므로, 이 문제의 해를 구하는 것이 primal problem의 해를 구하는 것과 동일하다.

Idea of SVM

SVM의 concept은 여백(margin)에서 시작한다.

두 부류의 샘플 사이의 여백(margin)의 크기를 극대화하는 분류직선을 찾는다.

- 여백(**margin**) : 결정 초평면(직선)으로부터 가장 가까운 샘플까지의 거리의 2배



How to find the best margin?

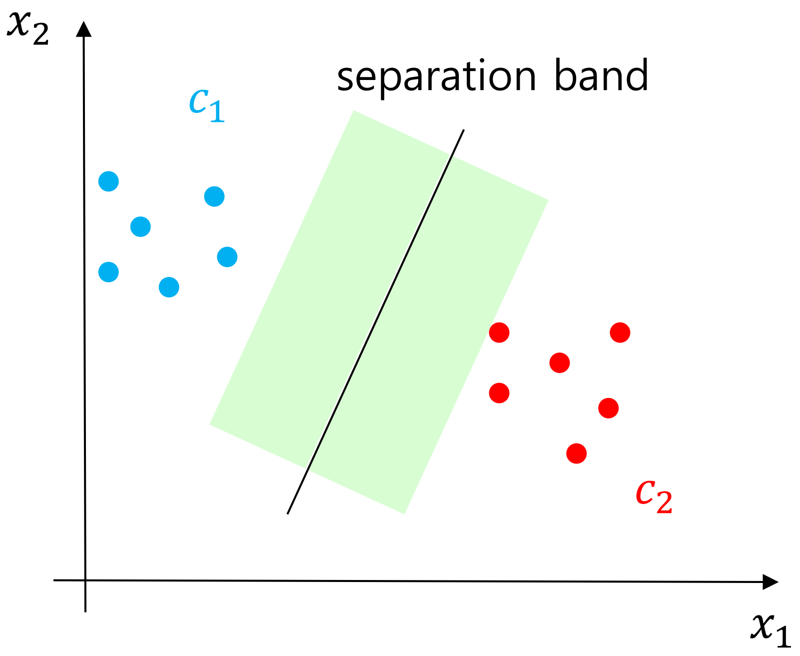
SVM의 종류

선형 SVM

- 선형 분리 가능한 상황(Hard margin)
- 선형 분리 불가능한 상황(Soft margin)

비선형 SVM

선형 분리 가능한 상황



(분할 띠 안에 데이터가 존재하지 않을 때)

Problem of SVM

Problem : margin을 극대화하는 분류직선을 찾아라.

- support vector, $\mathbb{x}_s$: 분류직선으로부터 가장 가까운 sample
- margin의 크기 = $\frac{2|d(\mathbb{x}_s)|}{\|\mathbb{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbb{w}\|}$ (직선의 방정식은 rescale이 가능함. 편의상 1로 계산)
- 훈련집합 $X = \{(\mathbb{x}_1, t_1), (\mathbb{x}_2, t_2), \ldots, (\mathbb{x}_n, t_n)\}$
  - if $\mathbb{x}_i \in c_1$, then $t_i = 1$
  - if $\mathbb{x}_i \in c_2$, then $t_i = -1$

$$\begin{aligned} &\text{maximize} && \frac{2}{\|\mathbb{w}\|} \\ &\text{subject to} && \mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b \geq 1 \quad \forall \mathbb{x}_i \in c_1 \\ & && \mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b \leq -1 \quad \forall \mathbb{x}_i \in c_2 \end{aligned}$$

※ 가정 : 모든 샘플을 옳게 분류한다. 즉 모든 샘플이 분할 띠의 바깥에 놓여있다.

Primal problem of SVM

Primal problem (조건부 최적화 문제)

- $\frac{2}{\|\mathbb{w}\|}$를 최대화하는 문제는 비용함수 $\frac{\|\mathbb{w}\|^2}{2}$를 최소화하는 문제로 변형할 수 있다.

minimize $\quad J(\mathbb{w}) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2$

subject to $\quad t_i(\mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b) \geq 1\ ,\ i = 1, \dots, N$

  - $J(\mathbb{w}) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2$는 $\|\mathbb{w}\|$의 2차식으로 이루어져 있기 때문에 convex 함수이다.
  - inequality constrain가 모두 선형이기 때문에 convex 함수이다.
  - inequality constrain을 만족시키는 영역(feasible)은 convex set이다.
- Primal problem은 convex optimization problem이다.
- Primal problem의 해는 global solution이 된다.

Primal problem of SVM

Primal problem을 아래와 같은 순서로 변형시킬 것이다.

Primal problem

↓

조건부 최적화 문제
- Lagrangian 사용
- Lagrange dual function 사용

Lagrange dual problem

↓

- Objective(Cost) function : convex
- constraints are differentiable.

Wolfe dual problem

Lagrangian / Lagrange dual problem of SVM

Lagrangian of primal problem

- $\mathbb{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^T$를 Lagrange multiplier라고 하자. $\alpha_i \geq 0$ for $i = 1, \dots, N$

$$\mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \mathbb{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (t_i (\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - 1)$$

Lagrange dual function of primal problem

$$g(\mathbb{a}) = \inf_{\mathbb{w},b} \mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \mathbb{a}) = \inf_{\mathbb{w},b} \left(\frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (t_i (\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - 1) \right)$$

Lagrange dual problem of primal problem

maximize	$g(\mathbb{a}) = \inf_{\mathbb{w},b} \mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \mathbb{a})$
subject to	$\mathbb{a} \succcurlyeq 0$

Wolfe dual problem of SVM

Wolfe dual problem

- 목적함수 $\frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2$ 는 convex 함수이다.
- 목적함수와 제약조건식이 모두 미분 가능하다.

maximize $\quad \mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \mathbb{a}) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 - \sum_{i=1}^{N} \alpha_i (t_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - 1)$

subject to $\quad \mathbb{a} \geqslant 0,\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbb{w}} = 0,\ \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial b} = 0$

$$\alpha_i \geq 0,\ i = 1, \dots, N \qquad \mathbb{w} = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i \mathbb{x}_i \qquad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$$

$\Downarrow$

maximize $\quad \mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$

subject to $\quad \alpha_i \geq 0,\ i = 1, \dots, N$

$\qquad \sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$

Wolfe dual problem of SVM

maximize	$\mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i\alpha_j t_i t_j \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$
subject to	$\alpha_i \geq 0,\ i = 1, \dots, N$
	$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$

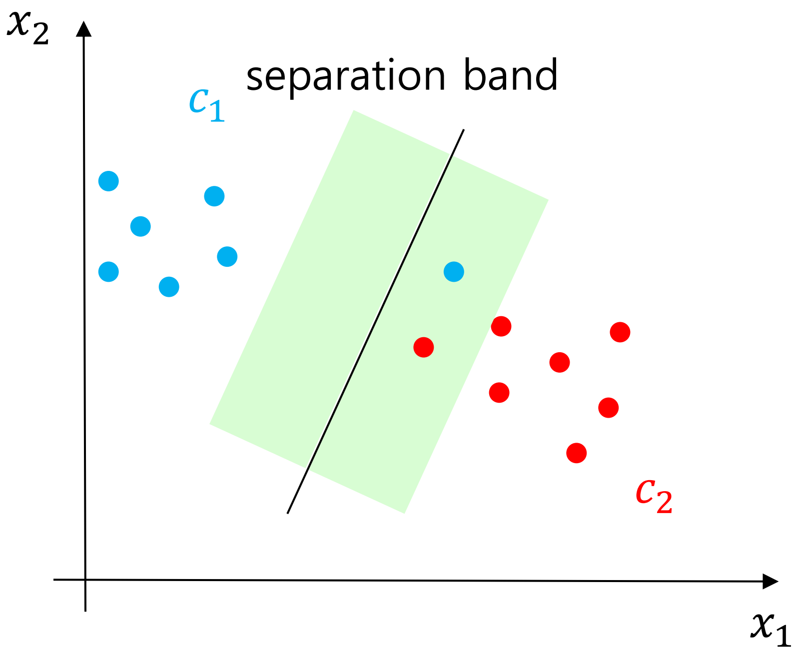
한 개의 등식 조건과 N개의 부등식 조건을 가진 2차(quadratic) 목적 함수의 최대화 문제이다.

$\mathbb{w}$, b를 구하는 문제가 아닌, Lagrange multiplier $\mathbb{a}$를 구하는 문제로 변경된다.

목적 함수에서 특징 벡터 $\mathbb{x}_i$가 혼자 나타나지 않고, 두 개의 특징 벡터의 내적 $\mathbb{x}_i^T\mathbb{x}_j$으로 나타난다.

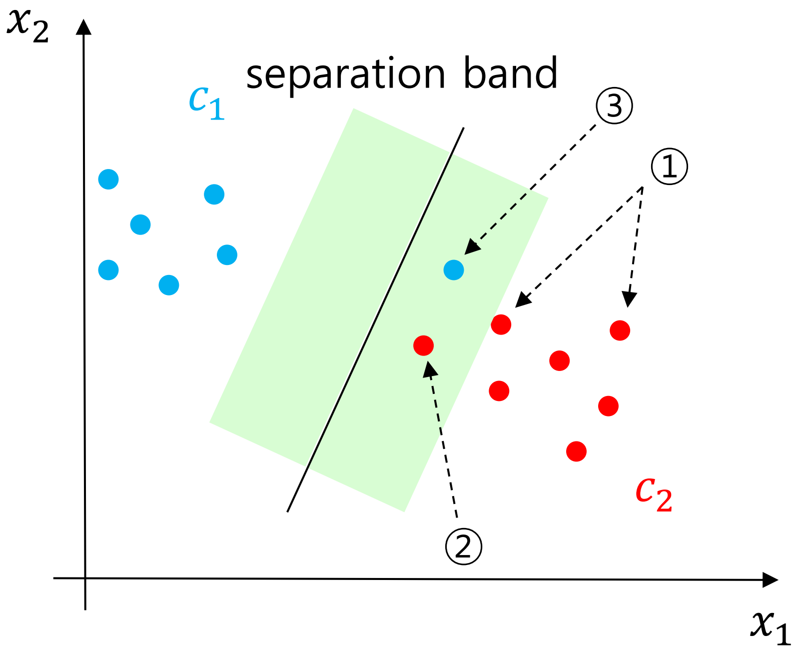
N^2의 항을 계산해야 한다.

선형 분리 불가능한 상황$_{\text{soft margin}}$



(분할 띠 안에 데이터가 존재하거나, 분류오류가 생기는 경우)

샘플의 위치

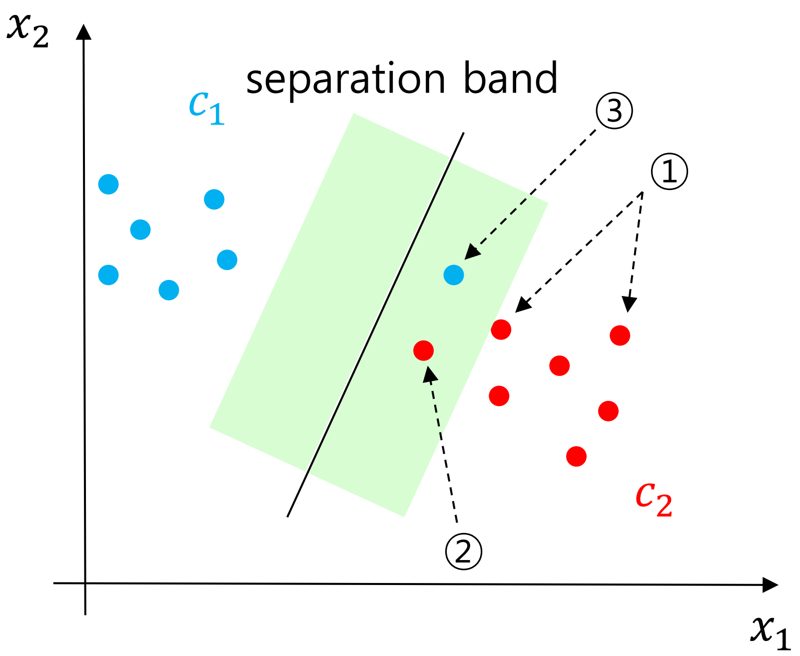


① 분할 띠의 경계에 있거나(support vector), 분할 띠의 바깥에 있다.
$\Rightarrow \mathbf{1} \leq \boldsymbol{t}(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b})$

② 분할 띠의 안쪽에 있고, 자기가 속한 부류의 영역에 있다.
$\Rightarrow \mathbf{0} \leq \boldsymbol{t}\left(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}\right) < \mathbf{1}$

③ 결정 경계를 넘어 자신이 속하지 않은 부류의 영역에 있다.
$\Rightarrow \boldsymbol{t}\left(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}\right) < \mathbf{0}$

샘플의 위치



slack 변수 ξ를 사용하여, 3가지 경우를, 하나의 식으로 표현

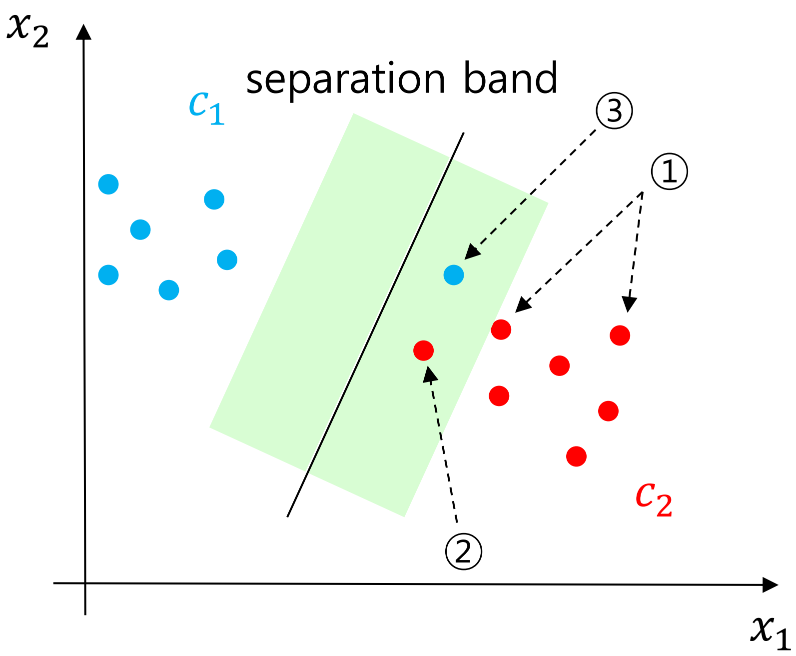
$$\boldsymbol{t}\left(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}\right) \geq \mathbf{1} - \xi$$

① $\mathbf{1} \leq \boldsymbol{t}(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}) \Rightarrow \xi = 0$

② $\mathbf{0} \leq \boldsymbol{t}\left(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}\right) < \mathbf{1} \Rightarrow 0 < \xi \leq 1$

③ $\boldsymbol{t}\left(\mathbb{w}^{\boldsymbol{T}}\mathbb{x} + \boldsymbol{b}\right) < \mathbf{0} \Rightarrow \xi > 1$

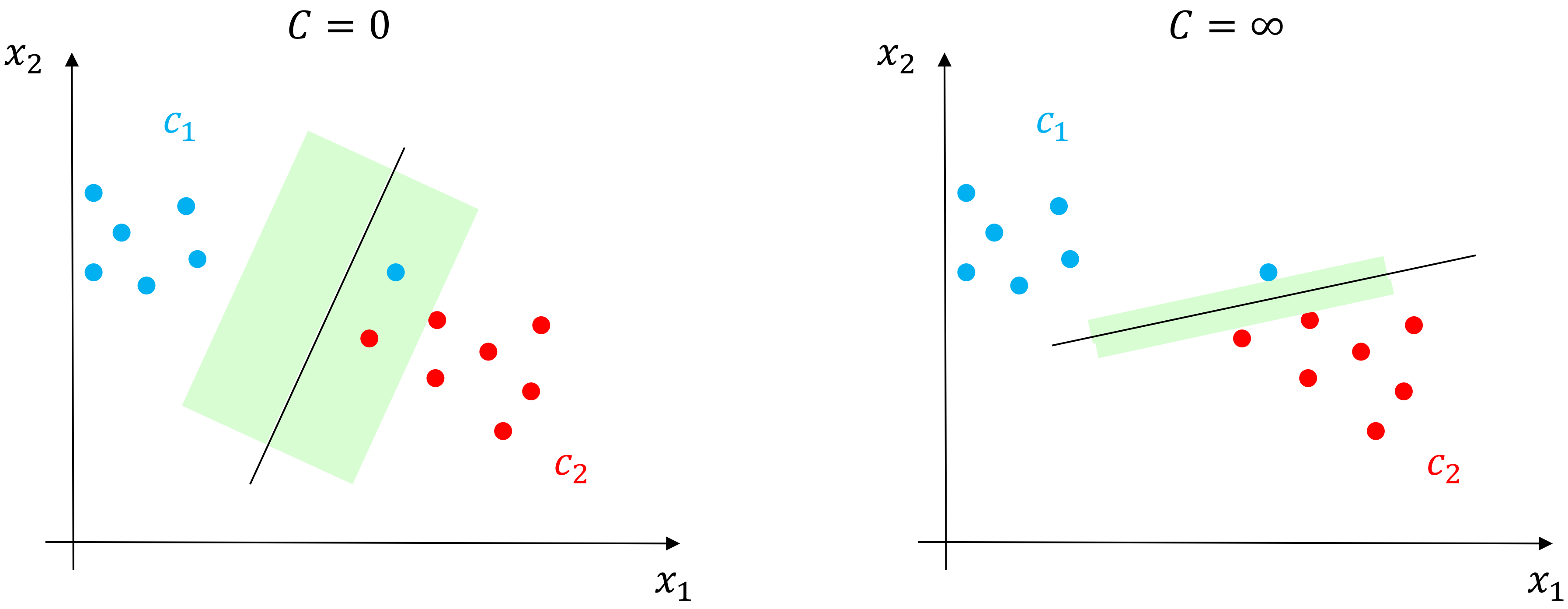
Objective function of soft margin SVM



우리가 해결해야 할 문제는 다음 2개의 목적을 만족시켜야 한다.

- 목적 1 : margin을 최대화 시켜야 한다.
- 목적 2 : ②, ③ 경우에 해당하는 샘플의 수를 최소한으로 줄여야 한다.

Objective function of soft margin SVM



2가지의 목적에 맞게 목적함수를 아래와 같이 변경하도록 한다.

$\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$라고 하자.

두 가지 목적중 어느 것에 비중을 둘지를 결정하는 매개 변수.
$C = 0$이면 목적2를 무시한다. $C = \infty$이면 목적 2만 고려한다.

$$J(\mathbb{w}, \Xi) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N} \xi_i$$

Primal problem of soft margin SVM

따라서 C는 적절히 조절되어야 한다.

$$J(\mathbb{w}, \Xi) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$$

목적함수가 주어졌음으로, 조건부 최적화 문제를 유도할 수 있다.

Primal problem (선형 분리 불가능한 상황)

minimize	$J(\mathbb{w}) = \frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i$
subject to	$t_i\left(\mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b\right) \geq 1 - \xi_i \; , \; i = 1, \dots, N$
	$\xi_i \geq 0, \; i = 1, \dots, N$

- 목적함수 $J(\mathbb{w})$는 convex
- 조건식 모두 미분가능하다.

Wolfe dual problem of soft margin SVM

Lagrangian

$$\mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \Xi, \mathbb{a}, \mathbb{b}) = \left(\frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i(t_i(\mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b) - 1 + \xi_i) + \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i\right)$$

- $\mathbb{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$, $\mathbb{b} = (\beta_1, \dots, \beta_N)$, $\Xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$

Wolfe dual problem

maximize $\mathcal{L}(\mathbb{w}, b, \Xi, \mathbb{a}, \mathbb{b})$

$= \left(\frac{1}{2}\|\mathbb{w}\|^2 + C\sum_{i=1}^{N}\xi_i\right) - \left(\sum_{i=1}^{N}\alpha_i(t_i(\mathbb{w}^T\mathbb{x}_i + b) - 1 + \xi_i) + \sum_{i=1}^{N}\beta_i\xi_i\right)$

subject to $\mathbb{a} \succcurlyeq 0$, $\mathbb{b} \succcurlyeq 0$, $\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\mathbb{w}} = 0$, $\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial b} = 0$, $\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\Xi} = 0$

$\alpha_i \geq 0,\ i = 1, \dots, N$

$\beta_i \geq 0,\ i = 1, \dots, N$

$$\mathbb{w} = \sum_{i=1}^{N}\alpha_i t_i\,\mathbb{x}_i$$

$$\sum_{i=1}^{N}\alpha_i\,t_i = 0$$

$C = \alpha_i + \beta_i$

Wolfe dual problem of soft margin SVM

Wolfe dual problem

maximize $\mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$

subject to $\sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$

$0 \leq \alpha_i \leq C,\ i = 1, \dots, N$

- soft margin 최적화 문제의 솔루션은 훈련 샘플을 세 가지 경우로 분류
  - $\alpha_i = 0$: 샘플들은 support vector이거나, margin 바깥쪽에 있다.
  - $0 < \alpha_i < C$: 샘플들은 support vector
  - $\alpha_i = C$: 샘플들은 support vector이거나, margin 안쪽에 있다.

Wolfe dual problem of soft margin SVM

문제의 솔루션은 KKT 조건을 만족한다.

- $C = \alpha_i + \beta_i$
- $\beta_i \xi_i = 0$
- $\alpha_i \left(y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - (1 - \xi_i) \right) = 0$
- $\xi_i \geq 0$

$\alpha_i = C$

- $\beta_i = 0, \xi_i \geq 0$
- $\left(y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - (1 - \xi_i) \right) = 0$

$\Rightarrow y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) \leq 1$

$\alpha_i = 0$

- $\beta_i = C, \xi_i = 0$
- $\left(y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - (1 - \xi_i) \right) \geq 0$

$\Rightarrow y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) \geq 1$

$0 < \alpha_i < C$

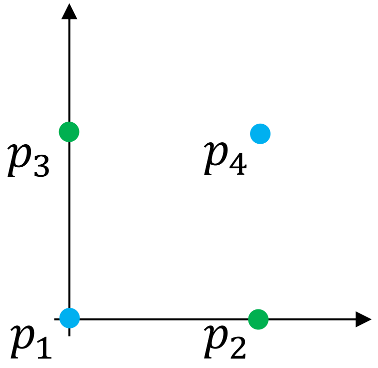
- $0 < \beta_i < C, \xi_i = 0$
- $\left(y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) - (1 - \xi_i) \right) = 0$

$\Rightarrow y_i(\mathbb{w}^T \mathbb{x}_i + b) = 1$

비선형 SVM의 Idea

실제 세계에서 발생하는 분류 문제에서는 선형 분류기로 높은 성능을 얻는다는 것은 가능성이 낮다.

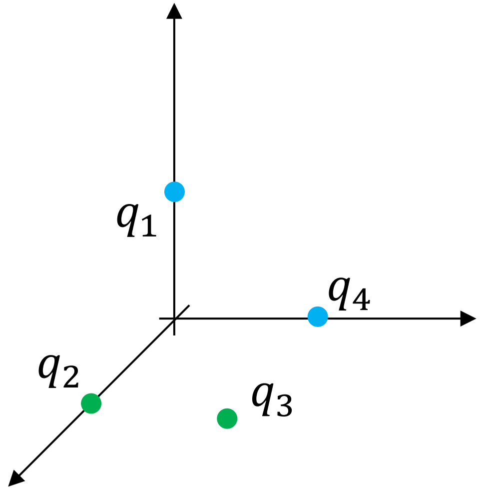
원래 특징 공간에서는 선형 분리 가능하지 않은데 이 공간을 <u>*더 높은 차원의 새로운 공간*</u>으로 매핑하여 선형 분리 가능하게 만들 수 있다.



원래 공간 : 선형 분리 불가능

$$\Phi: L \to H$$

$$\Phi(p_i) = q_i$$



변형된 공간 : 선형 분리 가능

Kernel Function

공간 L에서 공간 H로의 <u>공간 매핑</u>

$$\underline{\Phi: L \rightarrow H}$$

- 보통, 공간 H의 차원은 L보다 훨씬 높다.

커널 함수(Kernel function)

- 두 벡터 $\mathbb{x}, \mathbb{y} \in L$
- 두 벡터 $\Phi(\mathbb{x}), \Phi(\mathbb{y}) \in H$
- 함수 $K: L \times L \rightarrow R$(실수공간)

$$\boldsymbol{K}(\mathbb{x}, \mathbb{y}) = \boldsymbol{\Phi}(\mathbb{x}) \cdot \boldsymbol{\Phi}(\mathbb{y})$$

- 커널 함수의 값과 매핑된 두 벡터의 내적의 값이 같아야 한다.

Kernel Function 예제

$\mathbb{x} = (x_1, x_2)^T, \mathbb{y} = (y_1, y_2)^T$, $\mathbb{x}, \mathbb{y} \in L$

$K(\mathbb{x}, \mathbb{y}) = (\mathbb{x} \cdot \mathbb{y})^2 = x_1^2 y_1^2 + 2x_1 x_2 y_1 y_2 + x_2^2 y_2^2$

$\Phi(\mathbb{x}) = \left(x_1^2, \sqrt{2} x_1 x_2, x_2^2\right) \in H$

$$
\begin{aligned}
K(\mathbb{x}, \mathbb{y}) &= (\mathbb{x} \cdot \mathbb{y})^2 \\
&= x_1^2 y_1^2 + 2x_1 x_2 y_1 y_2 + x_2^2 y_2^2 \\
&= \left(x_1^2, \sqrt{2} x_1 x_2, x_2^2\right)\left(y_1^2, \sqrt{2} y_1 y_2, y_2^2\right) \\
&= \Phi(\mathbb{x}) \cdot \Phi(\mathbb{y})
\end{aligned}
$$

Kernel substitution(trick)

Kernel substitution

- Kernel trick이라고도 한다.
- 어떤 수식이 벡터의 내적을 포함하고 있을 때, 그 내적을 커널 함수로 대치하여 계산하는 기법이다.
- 실제 계산은 L공간에서 커널 함수 K의 계산으로 이루어진다. 하지만 실제로는 Φ로 매핑된 고차원 공간 H에서 작업하는 효과를 얻는다.
- 차원의 저주를 피해가는 셈이다.
- **내적 연산**인 경우에만 사용할 수 있다.

SVM-커널 대치 도입

선형 분류기로 원래 특징 공간 L에서 높은 성능을 기대하기 어렵다면 L공간에서 작업하는 대신 매핑 함수 Φ로 더 높은 차원의 (즉, 선형 분리가 더 유리한) 새로운 공간 H로 매핑하고 H에서 작업

공간 L에서의 SVM 분류기는 아래의 목적함수를 이용

$$\mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$$

- $\mathbb{x}_1, \mathbb{x}_2 \in L,\ \mathbb{a} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_N)$

공간 H로 매핑되면, SVM 분류기는 아래의 목적함수를 이용

$$\mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \Phi(\mathbb{x}_i)^T \Phi(\mathbb{x}_j)$$

실제 계산에 사용되는 함수
계산은 원래 공간에서 수행

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \boldsymbol{K}(\mathbb{x}, \mathbb{y})$$

- $\Phi(\mathbb{x}_1), \Phi(\mathbb{x}_2) \in H$
- $\mathbf{dom} K \in L$

목표로 하는 고차원에서의 계산을, 커널함수를 사용하여 저차원에서 수행.
고차원에서의 결과값과 동일함을 달성

SVM-커널 함수의 종류

다항식 커널

$$K(\mathbb{x}, \mathbb{y}) = (\gamma \mathbb{x} \cdot \mathbb{y} + \gamma)^p$$

Gaussian Radial Basis Function 커널

$$K(\mathbb{x}, \mathbb{y}) = e^{-\frac{\gamma \|\mathbb{x} - \mathbb{y}\|^2}{2\sigma^2}}$$

하이퍼볼릭 탄젠트 커널 (Sigmoid 커널)

$$K(\mathbb{x}, \mathbb{y}) = \tanh(\alpha \mathbb{x} \cdot \mathbb{y} + \beta)$$

- 모든 α, β에 대하여 매핑함수가 존재하지는 않는다. $\alpha = 2$, $\beta = 1$이 적절한 값이다.

Mercer Theorm

머서의 정리에 따르면 함수 $K(\mathbb{a}, \mathbb{b})$가 Mercer's condition를 만족할 때, $\mathbb{a}$와 $\mathbb{b}$를 더 높은 차원의 다른 공간에 매핑하는 $K(\mathbb{a}, \mathbb{b}) = \phi(\mathbb{a}^T)^T \phi(\mathbb{b})$와 같은 함수 ϕ가 존재. ϕ를 모르더라도 ϕ가 존재하는 것은 알기 때문에 K를 커널로 사용할 수 있음.

- K가 매개변수에 대해 연속
- K는 대칭 $K(\mathbb{a}, \mathbb{b}) = K(\mathbb{b}, \mathbb{a})$

Gaussian RBF 커널의 경우 ϕ는 각 훈련 샘플을 무한 차원의 공간에 매핑하기 때문에, 실제로 매핑을 하여 볼 수 없음.

자주 사용하되는 Sigmoid 커널은 머서의 조건을 모두 따르지 않지만 일반적인 실전에서는 잘 작동함.

M부류 SVM

1대 M-1방법

- M개의 이진 분류기를 생성
  - j번째 이진 분류기는 부류 c_j와 나머지 $M-1$개 부류를 분류
  - c_j에 속하는 샘플은 양의 영역, 나머지 부류에 속하면 음의 영역으로 구분
- 결정 초평면 함수의 값이 가장 큰 부류로 분류
  - $k = \arg\max_j d_j(\mathbb{x})$

1대 1방법

- 부류 쌍을 분류하는 이진 분류기를 $\frac{M(M-1)}{2}$개 생성
  - $d_{ij}(\mathbb{x})$는 c_i와 c_j를 분류하는 이진 분류기의 결정 초평면
  - $\mathbb{x}$에 대하여 $d_{ij}(\mathbb{x})$가 c_i로 분류하면 부류 c_i이 한표, 반대면 c_j가 한표를 얻음
  - 2번 스텝을 $\frac{M(M-1)}{2}$번 반복하여 가장 많은 표를 얻은 부류로 $\mathbb{x}$를 분류

How to compute $\mathbb{a} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_N)$

Sequential Minimal Optimization (순차적 최소 최적화) 를 이용한다.

SMO의 기본 아이디어

커다란 최적화 문제를, 작은 문제들로 나누어 해결한다.

- 작은 문제들은 쉽게 해결할 수 있으며, 순차적으로 해결된다.
- 순차적으로 해결된 문제들의 답은 모두 같게 되고, 모든 문제를 다함께 처리한 것과 같은 효과가 있다.

커다란 최적화 문제 : $\mathbb{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$의 최적화

나누어진 작은 문제 : 적당한 α_i, α_j의 쌍을 최적화

SMO의 기본 아이디어

Platt이 제안한 알고리즘 (강의노트에서는 simple version을 다루겠다.)

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$$

수학적 아이디어는 Coordinate ascent를 사용한다.

Loop until convergence : {

For $i = 1, \dots, m$, {

$$\alpha_i := \arg\max_{\hat{\alpha}} W(\alpha_1, \dots, \alpha_{i-1}, \hat{\alpha}_i, \alpha_{i+1}, \dots, \alpha_N)$$

}

}

- α_i의 최적값을 찾기위해, α_i를 제외한 값들을 상수값으로 고정시킨 후, W를 optimize 시킨다.

SMO의 기본 아이디어

$$\sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i = 0$$

초기값을 0으로 하는 $\mathbb{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ 생성

(while) 반복 횟수 M이 임계값보다 작을 때 반복

(for) α_i, $i = 1, \dots, N$ 에 대해 반복 (라그랑지 승수에 대해)

라그랑지 승수 α_i가 최적화 될 수 있다면

임의로 다른 라그랑지 승수 α_j를 선택

Appendix 1

새로운 α_j를 계산 (새로운 α_j는 목적함수의 optimization으로부터 나옴)

α_j를 최적화 할 수 없다면 next i continue

Appendix 2

α_j를 최적화 할 수 있다면 α_i, b를 새롭게 계산

최적화된 라그랑지 승수의 쌍이 하나도 없다면, 반복 횟수 M을 1 증가 시킨다.

Simplified SMO 알고리즘

α_i, α_j를 선택

- α_i가 최적화 될 수 있는 조건
  - 라그랑지 승수 α_i에 대응되는 샘플의 참 값(t_i)과, SVM계산 결과($\sum_{j=1}^{N} \alpha_j t_j \mathbb{x}_j^T \mathbb{x}_i + b$)의 차이가 허용 가능한 수치(tolerance) 이상인 경우
  - 이 경우에 α_j를 random하게 선택

새로운 $\mathbb{a}$에 대하여 b를 구한다.

- 새로운 α_i와 α_j가 적용된 $\mathbb{a}$

$\mathbb{a}$가 수렴할 때까지 위의 과정을 반복한다.

- 최적화되는(변경되는) 라그랑지 승수의 쌍이 발견되지 않는 상황이, 미리 설정해 놓은 임계치 이상 반복될 때.

Summary

여백(margin) 개념을 분류기 설계에 도입하고 여백을 극대화하는 결정 초평면을 찾아내는 것 ⇒ 뛰어난 일반화 능력을 확보하는 것

커널과 관련된 매개 변수, C값을 다양하게 설정하여 성능 실험을 하고 그 중 가장 뛰어난 값을 선택 (휴리스틱)

SVM은 일반화 능력이 뛰어남.

Appendix*(Advanced)*

$\boldsymbol{\alpha_j}$ 구하기

$\boldsymbol{\alpha_i}, \boldsymbol{b}$ 구하기

$\boldsymbol{\alpha_j}$ 구하기

$0 < \alpha_i < C$를 만족시키기 위하여 새로운 α_j는 다음의 범위를 만족시켜야 한다.

- $\alpha_i + \alpha_j = \gamma \ (t_i = t_j)$
  - $\gamma > C$
    - $\gamma - C \leq \alpha_j \leq C$
  - $\gamma < C$
    - $0 \leq \alpha_j \leq \gamma$

  $L = \max(0, \alpha_j + \alpha_i - C),\ H = \min(C, \alpha_j + \alpha_i)$

- $\alpha_i - \alpha_j = \gamma \ (t_i \neq t_j)$
  - $\gamma > 0$
    - $0 \leq \alpha_j \leq C - \gamma$
  - $\gamma < 0$
    - $-\gamma \leq \alpha_j \leq C$

  $L = \max(0, \alpha_j - \alpha_i),\ H = \min(C, C + \alpha_j - \alpha_i)$

$\boldsymbol{\alpha_j}$ 구하기

From here!

$$\mathcal{L}(\mathbb{a}) = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} \alpha_i \alpha_j t_i t_j \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$$

α_i와 α_j를 제외하고는 모두 고정된 상수로 표현

$$t_i\alpha_i + t_j\alpha_j = \text{Const.}$$

위의 식을 목적함수에 대입하여 α_j의 2차식으로 표현

1계 도함수, 2계 도함수 사용

$\boldsymbol{\alpha_j}$ 구하기

α_j^{old}

$$\alpha_j \coloneqq \alpha_j - \frac{t_j\left(E_i - E_j\right)}{\eta}$$

where

$$E_j = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i t_i \, \mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j + b - t_j$$

$$\eta = 2\mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j - \mathbb{x}_i \mathbb{x}_i - \mathbb{x}_j \mathbb{x}_j$$

$$\alpha_j \coloneqq \begin{cases} H & \text{if} \quad \alpha_j > H \\ \alpha_j & \text{if} \quad L \leq \alpha_j \leq H \\ L & \text{if} \quad \alpha_j < L \end{cases}$$

새로운 α_j

$\boldsymbol{\alpha_i, b}$ 구하기

α_i^{old}

새로운 $\boldsymbol{\alpha_i}$

$$\alpha_i \coloneqq \alpha_i + t_i t_j (\alpha_j^{old} - \alpha_j)$$

$$b_1 = b - E_i - t_i\left(\alpha_i - \alpha_i^{old}\right)\mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_i - t_j\left(\alpha_j - \alpha_j^{old}\right)\mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j$$

$$b_2 = b - E_j - t_i\left(\alpha_i - \alpha_i^{old}\right)\mathbb{x}_i^T \mathbb{x}_j - t_j\left(\alpha_j - \alpha_j^{old}\right)\mathbb{x}_j^T \mathbb{x}_j$$

새로운 $\boldsymbol{b}$

$$b \coloneqq \begin{cases} b_1 & \text{if} \quad 0 < \alpha_i < C \\ b_2 & \text{if} \quad 0 < \alpha_j < C \\ \dfrac{b_1 + b_2}{2} & \text{if} \quad \text{otherwise} \end{cases}$$