11. Support vector machines

- Remind) Logistic Regression : classify 2 (or K) class based on decision boundary

if inner product $\langle \theta, x \rangle$ is larger than threshold.

* Support Vector Machines (SVM)

Goal : 고차원 공간에서 선형 결정 경계를 통해 data를 분류하자

Idea : Margin을 ~~최대화~~해서 일반화 성능이 가장 좋은 classifier를 찾자.

비슷하게 SVM 에서 decision boundary 학습 but data distribution 가정 안함

11.1 The perceptron algorithm (Limit & Problem)

- 시작점 : Consider binary classification
- Dataset : $D = \{ (x_1, y_1), \cdots (x_n, y_n) \} \in \mathbb{R}^d \times \{-1, 1\}$
- Goal : Hyperlane 을 따라 2가지 클래스로 분류하는 classifier를 찾자.
- Classifier f :

$$f(x) = \begin{cases} 1 , & \langle \theta, x \rangle \geq b \\ -1 , & \langle \theta, x \rangle < b \end{cases}$$

* 전제 조건 : data is linearly separable, data가 선형적으로 완전히 분리가능해야만 작동
* 문제점 : 1) 해가 존재하지 않을 수 있음 (linearly non-separable data)
  2) 여러 해가 존재하면 어떤 θ를 선택할지 기준 없음 ($\overset{\text{parameter}}{\theta}$ and $\overset{\text{threshold}}{b}$ aren't necessarily unique)

↳ SVM Motivation   ① fully linear separable 을 가정 → ② 완벽히 선형분리되지 않는 case (duality 도입)

11.2 Hard-Margin SVM

- Goal : fully linearly separable data 에 대해 Margin을 최대화하는 Hyperplane 찾기

  In more detail : we want to maximize margin $m \geq 0$ s.t.

  1) "+1"로 분류된 모든 points는 Hyperplane의 양수 쪽 (positive side) 에 있고, 그 Hyperplane 까지의 거리는 최소 m.
  1) "-1"로 분류된 모든 points는 Hyperplane의 음수 쪽 (negative side) 에 있고, 그 Hyperplane 까지의 거리는 최소 m.

- distance of a point x to a hyperplane $\mathcal{H} = \{ x : \langle \theta, x \rangle = b \}$:

$$\text{distance}(x, H) = \frac{|\langle \theta, x \rangle - b|}{\|\theta\|_2} \qquad \frac{|\langle \theta, x - x_0 \rangle|}{\|\theta\|_2} = \frac{|\langle \theta, x \rangle - b|}{\|\theta\|_2} \quad ***$$

By definition, the vector θ is perpendicular to Hyperplane $\mathcal{H}$ ⇒ Any vector lies on Hyperplane.

만약 $x_0, x_1 \in \mathcal{H}$ 일때 $x_1 - x_0$ vector도 $\mathcal{H}$ 위에 있고, orthogonal to θ :

$$\langle x_1 - x_0, \theta \rangle = \langle x_1, \theta \rangle - \langle x_0, \theta \rangle = b - b = 0.$$

⇒ θ가 $\mathcal{H}$에 perpendicular, 최소 거리 ($x \sim \mathcal{H}$) 는 projection of $x - x_0$ onto θ, where $x_0 \in \mathcal{H}$.

이걸 수식으로 표현하면 ***

이걸 우리 Goal에 대입하면 : $y_i \dfrac{|\langle \theta, x_i \rangle - b|}{\|\theta\|_2} \geq m.$

- Optimization Task :

1) Margin 포함

$$\max_{m, \theta, b} m \quad \text{subject to} \quad y_i \frac{|\langle \theta, x_i \rangle - b|}{\|\theta\|_2} \geq m, \quad i \in \{1, \cdots, n\}$$

2) scale normalization

$\|\theta\|_2 = \frac{1}{m}$ 로 설정하면 → $\max_{\theta, b} \dfrac{1}{\|\theta\|_2}$ subject to $y_i \dfrac{|\langle \theta, x_i \rangle - b|}{\cancel{\|\theta\|_2}} \geq \dfrac{1}{\cancel{\|\theta\|_2}}$

미분할때 수식 쉽게 만들고, min 으로 하려고... $f(\theta) = \frac{1}{2}\|\theta\|^2 = \frac{1}{2}\theta^T\theta \rightarrow \nabla_\theta f(\theta) = \nabla_\theta \left(\frac{1}{2}\theta^T\theta \right) = \theta$

11.3 Soft-Margin SVM → 현실 data는 대부분 완벽히 선형분리 불가능 → duality 적용

Noise or Overlap이 있는 현실 data를 어떻게 다룰까? → Margin 조건을 일부 위반 허용하자 → slack variables ξ_i

- 새로운 constraint : $y_i(\langle\theta, x_i\rangle - b) \geq 1 - \xi_i \quad (\xi_i \geq 0)$

we take the slack variable in the objective into account by penalizing large values of ξ_i

- 새로운 optimization : $\min_{\theta, b} \frac{1}{2}\|\theta\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \xi_i$ subject to $y_i(\langle\theta, x_i\rangle - b) \geq 1 - \xi_i$, $\xi_i \geq 0$

$$\min_{\theta, b} \frac{1}{2}\|\theta\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \max(1 - y_i(\langle\theta, x_i\rangle - b), 0)$$

($y_i(\langle\theta, x_i\rangle - b) \geq 1 - \xi_i$, $\xi_i \geq 0$ 합침.

$$\min_{\theta, b} \frac{1}{2}\|\theta\|^2 + \lambda \sum_{i=1}^{n} \xi_i \text{ subject to } \xi_i = \max(1 - y_i(\langle\theta, x_i\rangle - b), 0)$$

12 Nonlinear Features Kernels [Idea!!!]

12.1 Linear estimators

- 우리가 이전까지 본 대부분의 모델 (Linear Reg, Logistic Reg, SVM …)은 모두 Linear estimator.
  즉, 학습결과인 예측 함수는 모두 $\langle \theta, x \rangle$ 같은 형태로 선형적인 결정을 내림. Kernel을 결합해서 비선형에서도 사용가능한 강력한 classifier를 만들자.

12.2 The Representer Theorem

- 많은 경우의 최적해 θ는 단순한 training data의 linear combination으로 표현 가능. i.e. $\hat{\theta} = \sum_i a_i x_i$ 형태
  이렇게 식을 정리하면 kernel methods에서 최적화를 θ 대신 α로 바꾸고, inner product만 알면 됨.

12.3 Nonlinear Features Kernel

- 구체적인 Idea를 도입하자.
  1) data를 고차원 feature space로 보내는 function $\phi(x)$를 정의하자.
  2) But 고차원 vector calculation 비싸니까, inner product $\langle \phi(x), \phi'(x) \rangle$ 만 효율적으로 계산하자 (kernel trick)
     ex) Polynomial, Gaußian kernel 등

12.4 SVMs with a Gaußian kernel

- SVM에 Kernel을 결합해서 non-linear decision boundary로 확장해보자.
- dual form으로 생각하면 모든 연산이 inner product에만 의존
  → 이 inner product를 kernel function으로 바꿈

· Dual Form ???

: 원래 최적화 문제 (primal problem)를 변형한 또 다른 형태의 최적화 문제. 원래 문제에 Lagrange Multiplier 도입해서 Dual Problem 구성하고, 이걸 통해 원래 문제 해 유도 아 계산 효과적으로 ...

- General primal problem

$$\min_{\theta} f(\theta) \quad s.t. \; g_i(\theta) \le 0, \; h_i(\theta) = 0$$

- Lagrangian problem

$$L(\theta, \alpha, \beta) = f(\theta) + \sum_i \alpha_i g_i(\theta) + \sum_j \beta_j h_j(\theta)$$

- Dual function

$$g(\alpha, \beta) = \min_{\theta} L(\theta, \alpha, \beta)$$

- Dual Problem

$$\max_{\alpha \ge 0, \beta} g(\alpha, \beta)$$

e.g) 초콜릿 공장주.

→ 최소비용으로 초콜릿 만들자!

→ 그래도 인력, 예산, 시간, ... 은 지켜야해 (제약조건)

Dual 시점으로 보자.

• 어떤 사람이 "이 조건 만족하게 하고 싶으면 돈 얼마줄래?" 라고 공장주에게 요구

⇒ 제약 조건에 가격 붙여서 "내가 이 조건 지키게 할테니 이정도는 받아야지" 라는 관점에서 최대한 받아내자.

< 조건들을 만족시키는 데 필요한 자원의 "가치"를 평가 >

Primal	Dual
비용을 최소화하자	제약조건을 고려해보자.
각 자원에 가격(α)을 붙여 총 가치 극대화	어떤 자원이 귀한가?
내가 얼마나 싸게 만들 수 있나?	이 제약 조건들은 얼마나 가치 있나?

e.g) $\min_x x^2 \quad s.t. \; x \ge 1$

* Primal

$x = 1 \rightarrow \min = 1^2 = 1.$

* Dual

$L(x, \alpha) = x^2 + \alpha(1 - x)$

$g(\alpha) = \min_x L(x, \alpha) = \min_x \; x^2 - \alpha x + \alpha$

· 최소조건 $\frac{d}{dx} L = 2x - \alpha = 0 \Rightarrow x = \frac{\alpha}{2}$

· 제약조건 $x \ge 1 \Rightarrow x = \frac{\alpha}{2} \ge 1 \Rightarrow \alpha \ge 2.$

$\rightarrow g(\alpha) = L(\frac{\alpha}{2}, \alpha) = -\frac{\alpha^2}{4} + \alpha.$

· 이걸 $\alpha \ge 2$ 에서 최대화하면 $\alpha = 2. \Rightarrow x = 1.$

e.g) $\min_{\theta \in \mathbb{R}^d} \frac{1}{2}\|X\theta - y\|^2 + \frac{\lambda}{2}\|\theta\|^2$

* Primal

$\theta^* = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$

여기서 $X \in \mathbb{R}^{d \times n}$ 인데. X^{-1} 를 구해야함..

$d = 10^6, n = 10^3$ 이면 $\Rightarrow X^{-1}$ $10^6 \times 10^6$ 역행렬 구해야함

* Dual

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\alpha^T (K + \lambda I)\alpha - y^T \alpha$$

• $K = XX^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (커널 행렬)

• $(K + \lambda I)^{-1} \alpha$ 역행렬 $\in \mathbb{R}^{n \times n}$ $10^3 \times 10^3$ 행렬

12. Nonlinear features and Kernels

12.1 Linear estimators

$loss(z,y)$ = 예측 ~ 실제값 간의 Loss

일반적

$$\min_{\theta} J(\theta) \quad \text{subject to} \quad J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} loss(h_\theta(x_i), y_i) + r(\theta)$$

Regularization Term

$h_\theta(x_i) = \langle \theta, x_i \rangle$

1) Logistic Regression : Loss can be formulated as function of inner products $\langle \theta, x \rangle$

$$loss(\langle \theta, x\rangle, y) = \log(1 + e^{-y\langle \theta, x\rangle})$$

- 위 일반식에서 $r(\theta) = 0$.
- 벡터 x를 $\langle \theta, x\rangle > 0$ 이면 1, 아니면 −1로 구별.

2) Ridge / Linear Regression

$$loss(\langle \theta, x\rangle, y) = (\langle \theta, x\rangle - y)^2, \quad r(\theta) = \underbrace{\frac{\lambda}{2}\|\theta\|_2^2}_{\text{Ridge Regression}}$$

3) Support vector machine (SVM)

$$loss(\langle \theta, x\rangle, y) = \max(1 - y(\langle \theta, x\rangle - b), 0), \quad r(\theta) = \frac{1}{2}\|\theta\|_2^2$$

이런 모든 model은 loss와 예측이 $\langle \theta, x\rangle$ 에만 의존하며, linear decision boundary만 표현가능

그렇다면

Regularized empirical risk minimization 의 해 $\hat{\theta}$는 어떤 구조를 가질까?

12.2 The Representer Theorem

LA) Span !!!

- Theorem 1 : Representer theorem

– 가정 : 만약 $r(\theta) = r(\|\theta\|_2)$, $h_\theta(x) = \langle \theta, x\rangle$, loss is convex

– 최적해 minimizer $\hat{\theta}$: $\hat{\theta} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i$, 즉, linear combination으로 표현가능.

이 Linear combination 구조 덕분에 1) parameter θ가 아닌 α_i만 학습하면 됨.

2) inner product 만으로 학습 가능 → Kernel trick

즉, model을 feature vector 공간에서 생각하지 않고 α를 통해 training sample space 에서 표현할 수 있음

ex) 병원, 환자 ~> 100개 features 수집. (혈압, 체온, 나이, ⋯) ➔ 각각 환자 data는 100차원 vector $x \in \mathbb{R}^{100}$

but 지금까지 병원이 모은 환자 수 = 50 명. ➔ training data는 $x_1, x_2, \cdots, x_{50} \in \mathbb{R}^{50}$

(x가 만드는 subspace는 많아봐야 max. 50차원

모델 예측이 $\hat{y} = \langle \theta, x\rangle$ 형태니까 100차원 전체 공간에서 아무 θ를 찾는게 아니라,

실제로는 traing sample (50개) 들이 span 하는 50차원 Subspace 안에서 예측값이 달라짐.

왜냐하면 traing loss는 $\langle \theta, x_i\rangle$만 사용되는데 이건 x_i 방향 영향 받지만,

θ가 traing data에 직교인 부분은 영향 X

loss 영향 X, regularization 증가. (제한 없애는게 낫지)

(12.2 The Representer Theorem 증명)

Proof) $J(\theta) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} loss(\langle \theta, x_i \rangle, y_i) + r(\|\theta\|)$

만약 θ가 $x_1, x_2, \cdots, x_n$이 span 하는 subspace 에 속하지 않는다면, 거기에서 가장 가까운 점으로 projection 하면, object function의 값이 줄거나 같아진다. → 따라서 Optimum은 항상 이 Subspace 안에 있음.

Step 1: $\theta = \theta_{\parallel} + \theta_{\perp}$

- $\theta_{\parallel} \in span\{x_1, \cdots, x_n\}$ 즉 training data로 span되는 공간 위
- $\theta_{\perp} \in$ orthogonal complement 그 공간에 수직인 부분

(기하적 : 벡터를 subspace 위로 정사영)

Step 2: loss는 $\theta_{\perp}$와 무관

$\langle \theta, x_i \rangle = \langle \theta_{\parallel} + \theta_{\perp}, x_i \rangle = \langle \theta_{\parallel}, x_i \rangle + \underbrace{\langle \theta_{\perp}, x_i \rangle}_{\text{직교}} = 0.$

$\langle \theta, x_i \rangle = \langle \theta_{\parallel}, x_i \rangle$

Step3: Regularizer는 $\theta_{\perp}$를 늘릴 수록 증가

$r(\|\theta\|) = r(\|\theta_{\parallel} + \theta_{\perp}\|) \geq r(\|\theta_{\parallel}\|)$

즉, loss는 그대로인데 regularizer는 더 작거나 같아짐

⇒ $\theta_{\perp}$는 없애는 게 좋음 ≒ Optimum은 항상 $\theta_{\perp} = 0$

→ $\hat{\theta} \in span\{x_1, \cdots, x_n\}$ ⇒ $\hat{\theta} = \sum_i \alpha_i x_i$

12.3 Nonlinear Features and Kernels

기존 model은 모두 linear라서 복잡한 decision boundary 나누기 어려움

→ non-linear feature map $\Phi(x)$을 도입해서 고차원 공간에서 선형분리 가능하게 하자

그런데 $\Phi(x)$를 그대로 바꾸면 연산 복잡하니, Kernel을 사용하자.

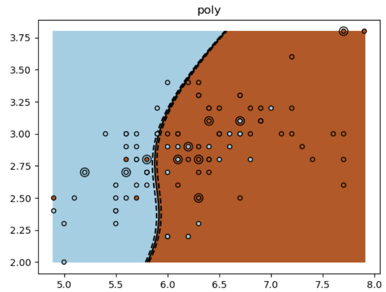
- Kernel Function $K(x, x')$

$K(x,x') = \langle \phi(x), \phi(x') \rangle$ → 고차원 $\phi(x)$는 계산 하지 않아도 됨

→ 대신 inner product 계산

- 자주쓰이는 Kernel

1) Polynomial : $K(x,x') = (\langle x, x' \rangle + c)^d$ 다항식 형태 비선형



2) Gaussian (RBF) : $K(x, x') = \exp\left(-\frac{\|x - x'\|^2}{2\sigma^2}\right)$ 무한 차원 확장 가능

3) Sigmoid $K(x,x') = \tanh\langle \alpha\langle x, x' \rangle + c \rangle$ 신경망과 유사.

12.4 Support vector machine with a Gaußian kernel

SVM을 non-linear decision boundary를 갖게 하자

• SVM – Margin을 최대화하는 결정경계 학습.

Hard-Margin SVM : $f(x) = \text{sign}(\langle \theta^*, x \rangle + b^*)$

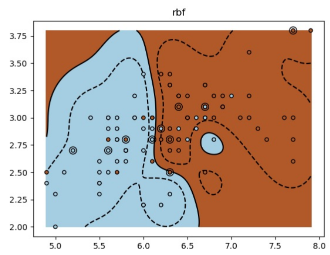
dual form :

$$\theta^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i \Rightarrow x(x) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i y_i \langle x_i, x \rangle + b\right)$$

(inner product 기반 이니 kernel 사용 가능)

• kernelized SVM

$$f(x) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i x_i K(x, x') + b\right)$$



* Gaußian (RBF) 사용 시 :

$$K(x, x') = \exp\left(-\frac{\|x - x'\|^2}{2\sigma^2}\right)$$