Support Vector Machine:





Contents

- 1. Introduction of Support Vector Machine
- 2. Lagrange Multiplier Theorem
- 3. Kernels
- 4. Code

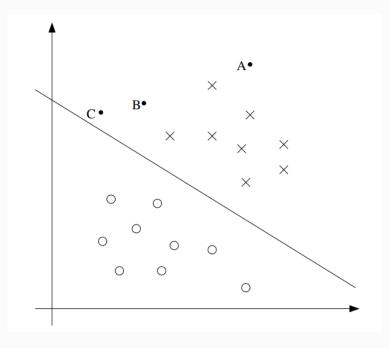
Support Vector Machine

How to find the best hyperplane

What is Hyperplane?

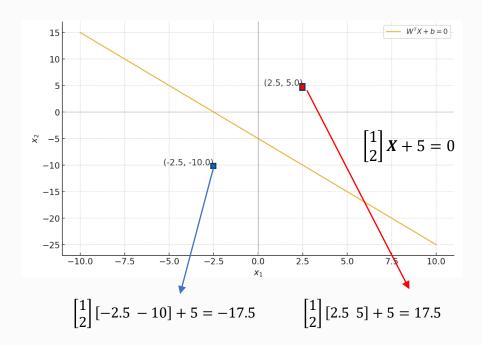
- Support vector machine은 그림의 O와 X를 나누는 최적의 boundary를 찾는 머신러닝 기법이다.
- 이 boundary를 초평면(hyperplane)이라고 한다.
- Hyperplane을 수식적으로 나타내면 다음과 같다:

$$\boldsymbol{W}^T\boldsymbol{X} + \boldsymbol{b} = 0$$



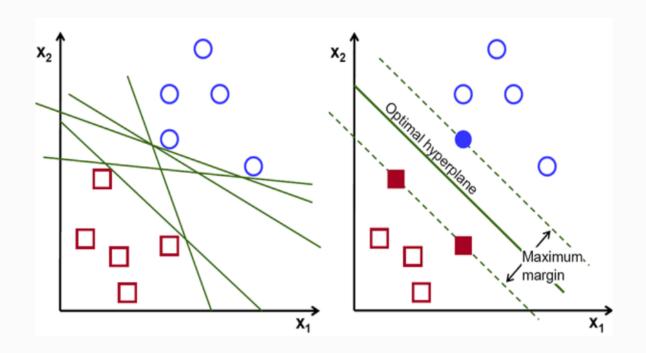
What is Hyperplane?

- Hyperplane을 기준으로 서로 다른 영역에 있는 데이터를 $\mathbf{W}^T\mathbf{X} + \mathbf{b}$ 에 넣었을 때, 다른 부호가 나오게 된다
- X에 대응되는 데이터를 $W^TX + b$ 에 넣으면 양수, O에 대응되는 데이터를 넣으면 음수가 나오는 Hyperplane을 찾는다
- 따라서 유효한 Hyperplane은 다음의 특징을 만족해야 한다
 - $\mathbf{W}^T x + b > 0$ if x is data corresponding to X
 - $W^T x + b < 0$ if x is data corresponding to 0
- 그런데 위의 식은 다소 복잡하기 때문에, 문제를 단순화시키기 위해 X에 대응되는 데이터의 label로는 1, 0에 대응되는 데이터의 label로는 -1을 부여한 뒤, $y(\mathbf{W}^T\mathbf{X} + b)$ 를 계산하면, 이 값은 항상 양수의 값을 가진다
- 따라서 유효한 Hyperplane이 가져야 하는 특징을 다음과 같이 단순 화시켜 나타낼 수 있다:
 - $y_i(W^TX_i + b) > 0$ for i = 1, ..., n



Optimal Hyperplane

- 하지만 문제는 데이터를 완벽하게 분리하는 '유효한' Hyperplane이 그림과 같이 여러 개 존재할 수 있다.
- 유효한 Hyperplane 중에서 이제는 'optimal' hyperplane 을 찾아야 한다.
- Optimal hyperplane: 가장 큰 Margin을 가지는
 hyperplane
- Margin: Support Vector들 사이의 거리
- Support Vector: Hyperplane에서 가장 가까운 각 진영의 데이터포인트
- 이때 Optimal hyperplane은 Support Vector들 사이의 중 앙에 위치해야 한다



Computing Margin

- 어떠한 Hyperplane이 유효하고, Support Vector의 정중앙을 지난다고 하자
 - Hyperplane: $\mathbf{W}^T \mathbf{X} + b = 0$
- Support vector를 x_1, x_2 라고 하자.
- 그러면 $\boldsymbol{W}^T x_1 + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{c}, \, \boldsymbol{W}^T x_2 + \boldsymbol{b} = -\boldsymbol{c}$ 이다
- 그러면 Margin은 $\frac{2c}{||\mathbf{w}||}$ 로 나타난다.
- 그런데 W와 b에 대한 scaling을 적절하게 하면 c=1로 만들 수 있기 때문에, 주로 Margin= $\frac{2}{||w||}$ 으로 생각한다
- 그리고 $\mathbf{W}^T \mathbf{x}_1 + b = 1$ 이라는 것은 $y_i(\mathbf{W}^T \mathbf{X}_i + b)$ 의 최소값이 1이라는 것이기 때문에, 기존에 유효한 Hyperplane을 위한 조건이었던 $y_i(\mathbf{W}^T \mathbf{X}_i + b) > 0$ for i = 1, ..., n을 다음과 같이 조금 더 구체적으로 나타낼 수 있게 된다:
 - $y_i(W^TX_i + b) \ge 1 \text{ for } i = 1, ..., n$

Optimal Hyperplane

- 최적의 Hyperplane을 찾는다는 것은, 유효한 Hyperplane의 조건 하에서 Margin을 최대화시킨다는 것이다
- 따라서 최적화 문제는 다음과 같다

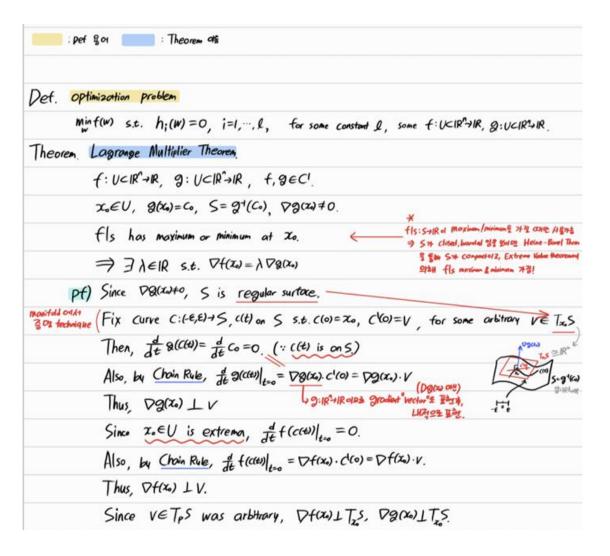
-
$$\max_{W,b} \frac{2}{||W||} s.t. y_i(W^T X_i + b) \ge 1 \text{ for } i = 1,..., n$$

$$- \min_{W,b} \frac{||W||^2}{2} s. t. y_i(W^T X_i + b) \ge 1 \text{ for } i = 1, ..., n$$

2 Lagrange Multipler Theorem

Theoretical background for optimization

Optimization Problem (via Lagrange Multiplier Theorem)



```
Thus, \nabla f(x_{0}) \| \nabla g(x_{0}).

Thus, \exists \lambda \in \mathbb{R} s.t. \nabla f(x_{0}) = \lambda \nabla g(x_{0}).

Corollary, S = g_{1}^{-1}(C_{0}) \cap \cdots \cap g_{K}^{-1}(C_{0}), \nabla g_{1}(x_{0}) \cdots \nabla g_{K}(x_{0}) linearly independent.

fls has maximum at x_{0}.

\Rightarrow \exists \lambda_{1}, \cdots, \lambda_{K} \in \mathbb{R} s.t. \nabla f(x_{0}) = \lambda_{1} \nabla g_{1}(x_{0}) + \cdots + \lambda_{K} \nabla g_{K}(x_{0}).

Def. Lagrangian.

L(W, B) = f(W) + \sum_{i=1}^{L} B_{i} h_{i}(W).

\frac{\partial L}{\partial W_{i}} = 0, \frac{\partial L}{\partial B_{i}} = 0 \frac{\partial G}{\partial B_{i}} = 0, \frac{\partial G}{\partial B_{i
```

Relation of Primal/Dual Optimization Problem

```
Def. Primal optimization problem
         Minf(w) s.t. g;(w)≤0 i=1,..., k h;(w)=0, i=1,..., l.
Def. generalized Lagrangian
        L(w,\alpha,\beta) = f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_i g_i(w) + \sum_{i=1}^{k} \beta_i h_i(w)
\Theta_{P}(w) := \max_{\alpha,\beta,\alpha;\geq 0} L(w,\alpha,\beta) = \max_{\alpha,\beta,\alpha;\geq 0} \left\{ f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_{i} \partial_{i}(w) + \sum_{i=1}^{k} \beta_{i} h_{i}(w) \right\}
 Then, Op(w)= (f(w), if g:(w) < 0, i=1,..., k, h:(w)=0, i=1,..., L
                                                                                   Straightforward!
Thus minf(w) s.t. 9:(w) <0, i=1,..., k h:(w)=0, i=1,..., l
        \iff \min_{w} \Theta_{p}(w) = \min_{w} \max_{\alpha,\beta,\alpha,2,0} L(w,\alpha,\beta)
Def. Dual optimization problem
                                                                               cf) f(2,w) = sin(2+w) equality not hold
                                                                                  LHS= -| (W=-2-5)
RHS= | (Z:=-W+5)
        Max min L(W, x,B)
Lemma. Minimax Inequality,
                                       domain Z 不知如
            For any function f: ZXW+IR, sup inf f(2,w) \le inf sup f(2,w).
      Pf) Fix ZEZ. Then, inff(z,w) sf(z,w), wew. ("dot of infinum) ... o
            Fix weW. Then, f(z,w) \supf(z,w), \forall zeZ. ("dot of supremum) ... @
            Then, inff(z,w) < supf(z,w), VweW, V2EZ
            Then, VWEW, SUPF(Z,W) is upper bound of intf(Z,W) => SUPINT f(Z,W) < SUPF(Z,W)
             Also, supint f(Z,m) is lower bound of supf(Z,m) => supint f(Z,m) < int supf(Z,m).
```

```
Remark. By minimax inequality, J^{\bullet}:=\max_{\alpha,\beta,\gamma,z,\sigma}\min_{w}L(w,\alpha,\beta)\leq P^{\bullet}:=\min_{\alpha,\beta,\gamma,z,\sigma}\max_{\alpha,\beta,\gamma,z,\sigma}L(w,\alpha,\beta) \Rightarrow Weak duality Def. Slater's condition

The problem satisfies Slater's condition if it is strictly feasible, f^{\bullet} the strong strong strong strong strong duality f^{\bullet} i.e. J^{\bullet}w\in D s.t. J^{\bullet}(w_{\sigma})<0, J^{\bullet}(w_{\sigma})<0, J^{\bullet}(w_{\sigma})=0, J^{\bullet}(w_
```

KKT Conditions

```
Def. KKT conditions (Karush-Kuhn-Tucker conditions)
                                       \frac{\partial}{\partial W_i} L(W, \alpha, \beta) \Big|_{V = W^{\dagger}, \alpha = \alpha^{\dagger}, \beta = \beta^{\dagger}} = O, \quad i = 1, \dots, d. \quad (1)
                                        \frac{\partial}{\partial \beta_i} L(\mathbf{w}, \alpha, \beta_i) \Big|_{\mathbf{w} = \mathbf{w}^{\mathsf{H}}, \mathbf{x} = \alpha^{\mathsf{H}}, \beta = \beta^{\mathsf{H}}} = 0, i = 1, \cdots, \ell. (2)
                                                                                                                               \alpha_i^* g_i(w^*) = 0, i=1, \dots, K. (3)
                                                                                                                                              Q_{i}(\mathbf{r}^{*}) \leq 0, i=1,\cdots,K, (4)
                                                                                                                                                         x; ≥0, i=1, ..., K. (5)
Theorem. For problem with strong duality (e.g., assume Slotter conditions)
                                                            W^*, X^*, B^* satisfies KKT conditions \iff W^*, X^*, B^* are primal and dual solutions.
                              pf) \Leftarrow f(w^*) = \min_{w \in \mathcal{W}} L(w, \alpha^*, \beta^*) ("dual solutions)
                                                                                                                 = \min_{w} \left( f(w) + \sum_{i=1}^{k} \alpha_{i}^{k} g_{i}(w) + \sum_{i=1}^{k} \beta_{i}^{k} h_{i}(w) \right)
                                                                                                                 \leq f(w^*) + \sum_{i=1}^k \alpha_i^* g_i(w^*) + \sum_{i=1}^k \beta_i^* h_i(w^*)
                                                                                                                < f(w*) ( : x,* >0, 9, (w*) <0, V; \( \varepsilon \), \( \varepsilon \varepsilon \), \( \varepsilon \v
```

Apply to Optimal Margin Classifier

```
Ex. (Optimal Margin Classifier)
      Vi∈[n], x(0∈|Rd, y(0∈{-1,1}, W=(W,-, Nd)'∈|Rd, b∈|R
      Solve min $11mll s.t. Y ("(w x ("+6) 21, i=1, ..., n., which is primal optimization problem.
             \iff \min_{w,b} \frac{1}{2} \|w\|^2 = s.t. \quad -y^{(i)} (w^T x^{(i)} + b) + 1 \le 0, \quad i = 1, \dots, n. 
f, g_i : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} (\cong \mathbb{R}^{d+1}) \to \mathbb{R}
     Define generalized Lagrangian L(W, b, a) := = = | | | | - Za; (Y(i) (WTx(i)+b)-1)
    Since convex and solisties Slater's condition, then strong duality holds.
     Thus ETS w*, b*, ox satisfies KKT conditions,
      (+) KKT Conditions Rese of B2+10+16 minimas (w*, a*, b*) closed form ? 전线到 0127星
      (+) (의의)
          KKT Conditions를 통해 위문제외 통계가 되는 dual optimization problem을 다음처럼 쓸 수 있음.
          Mox (2α; -12 y(0) y(0)α,α, (x(0), x(0))) s.t. α,≥0, i=1,...,η, 2α, y(0)=0
           ⇒ Input data들의 inner product 행태로 표현된 깔끔한 이 식의 structure 확인 개봉. (약교객을 함때 유통)
```

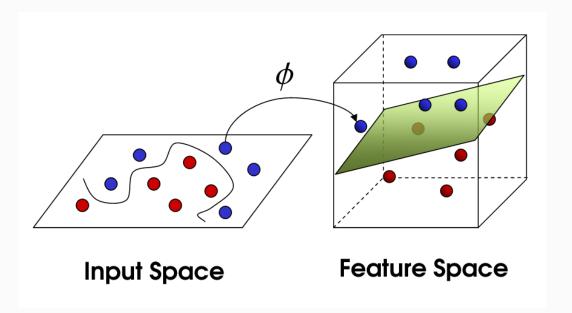
3

Kernels

Dual solution is in form of inner product!

Kernels

- 만약 데이터가 선형적으로 분리할 수 없는 형태라면, 데이터 를 고차원으로 mapping을 시켜서, 고차원에서 SVM을 사용하면 된다.
- 하지만 이러한 방법에는 두 가지 문제점이 존재한다
 - 고차원에서 계산을 수행하므로 계산 비용이 증가한다
 - 어떠한 Basis function을 사용해야 데이터들이 선형적으로 분리 가능한지에 대한 사전 지식이 없을 수 있다.
- 이러한 문제점들을 해결한 것이 바로 Kernel Trick이다.



Kernels

- Kernel은 다음과 같이 정의된다:
 - $k(x_i, x_j) = \phi(x_i)^T \phi(x_j)$
 - 즉 고차원으로 매핑했을 때, 데이터 간의 내적이 바로 커널인 것이다.
- Kernel의 장점
 - 1. 하나의 커널이 여러 개의 고차원 공간을 대표한다. 따라서 하나의 커널을 살펴보는 것이 여러 개의 공간을 한번에 살펴보는 효과 를 가져온다
 - 2. 일반적으로 데이터를 무한 차원으로 매핑하는 건 불가능한데, 이러한 무한 차원에서 사용되는 내적값을 나타낼 수도 있다 (Gaussian Kernel). 어떠한 유한 차원의 데이터를 무한 차원으로 매핑하게 되면, 높은 확률로 선형적으로 분리 가능하게 된다.
- SVM에서는 데이터의 내적의 형태만을 사용하게 되는데, 그러면 굳이 '데이터 => 변환 => 내적'의 단계를 거치기보다, 바로 '데이터 => 내적'으로 가고자 하는 것이 바로 Kernel trick이다.

Advantages of Kernels

제곱꼴도 Kernel이다

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = (\mathbf{x}^T \mathbf{z})^2 = (x_1 z_1 + x_2 z_2)^2$$

= $x_1^2 z_1^2 + 2x_1 z_1 x_2 z_2 + x_2^2 z_2^2$

- 다음의 내적과 같으며 해가 유일하지 않다

$$(x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2)$$
 and $(z_1^2, \sqrt{2}z_1z_2, z_2^2)$
 $(x_1^2, x_1x_2, x_1x_2, x_2^2)$ and $(z_1^2, z_1z_2, z_1z_2, z_2^2)$

- 따라서 하나의 커널을 사용함으로써 여러 개의 고차원 공간
 에 대한 탐색을 한번에 할 수 있다.
- 만약 제곱꼴을 커널로 사용했을 때, optimization이 안 된다면, 그와 관련된 모든 basis function으로는 데이터를 선형적으로 분리할 수 없다는 사실을 알 수 있다.

가우시안 커널(x와 z가 1차원)

아래의 수식은 가우시안 커널이 무한 차원의 공간에서의 내적임을 보이는 수식이다.

$$- e^{-\frac{(x-z)^2}{2}} = e^{-\frac{x^2}{2}}e^{-\frac{z^2}{2}}e^{xz} = e^{-\frac{x^2}{2}}e^{-\frac{z^2}{2}}\left(1 + xz + \frac{x^2z^2}{2!} + \frac{x^3z^3}{3!} + \cdots\right)$$

$$- \phi(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ x \\ \frac{x^2}{\sqrt{2!}} \\ \vdots \end{bmatrix}$$
; infinite dimensional

Optimization Using Kernel

- SVM에서의 Optimal Hyperplane을 찾기 위해선 원래는 다음의 Primal Optimization을 풀어야 한다
 - $min_{w,b} \frac{1}{2} ||w||^2$, s. $t y^{(i)} (w^T \phi(x^{(i)}) + b) \ge 1$, for i = 1, ..., n
- 하지만 이러한 형태는 $basis\ function\ \phi$ 를 정의해야만 하고 고차원에서 데이터를 다루어야 하는 단점이 존재한다
- 그래서 Dual Optimization을 사용할 것이다.
 - SVM은 다행히 Slater's condition을 만족하기 때문에 Dual Solution과 Primal Solution이 같다 (strong duality)
 - KKT condition을 활용하여 Dual Problem을 나타내면 다음과 같으며, 여기서 주목할 점은 Dual Problem에서는 ϕ 를 정의할 필요 없이 바로 커널만을 사용할 수 있다는 것이다.

$$max_{\alpha} W(\alpha) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{n} y^{(i)} y^{(j)} \alpha_{i} \alpha_{j} < \phi(x^{(i)}), \phi(x^{(j)}) >.$$
 $s. t. \alpha_{i} \geq 0, i = 1, \dots, n$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_{i} y^{(i)} = 0$$
• 이 부분을 커널로 대체

4 Code

Data

```
In [2]: # Hyperparameters
lr = 1e-3
C = 1
num_epochs = 2000

print('Number of training data:', x_train.shape[0])
print('Number of test data :', x_test.shape[0])
print('Feature dimension :', x_test.shape[1])
```

Number of training data: 76 Number of test data : 24 Feature dimension : 4

Train Data

- 76개의 4차원 데이터, +1, -1로 라벨링

Test Data

- 24개의 4차원 데이터

BGD Training

```
In [3]:

def svm_train_bgd(x, y, C, lr, num_epochs):
    N, D = x.shape
    w = np.zeros(D)
    b = 0

for i in range(num_epochs):
    indicator = 1 - y*(x@w + b)
    indicator[indicator < 0] = 0
    indicator[indicator > 0] = 1
    w_grad = w - C * x.T @ (indicator * y)
    b_grad = -C * np.sum(indicator * y)
    w = w - lr * w_grad
    b = b - lr * b_grad

return w, b
```

Input/Return 설명

- x: training data / y: training labels (1 or -1)
- C: slack cost / Ir: learning rate
- num_epochs: The number of training epochs
- w:weights/b:bias

Code 설명

- Loss를 최소화 하는 w, b를 Batch Gradient Descent 사용 해서 찾는다

$$\min_{\mathbf{w},b} L(\mathbf{w},b) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^{N} \max \left(0, 1 - y^{(i)} \left(\mathbf{w}^{\top} \mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)$$

$$\nabla_{\mathbf{w}} L(\mathbf{w},b) = \mathbf{w} - C \sum_{i=1}^{N} \mathbb{I} \left[1 - y^{(i)} \left(\mathbf{w}^{\top} \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \ge 0\right] y^{(i)} \mathbf{x}^{(i)},$$

$$\nabla_{b} L(\mathbf{w},b) = -C \sum_{i=1}^{N} \mathbb{I} \left[1 - y^{(i)} \left(\mathbf{w}^{\top} \mathbf{x}^{(i)} + b\right) \ge 0\right] y^{(i)},$$

SGD Training

```
In [4]: def svm_train_sgd(x, y, C, lr, num_epochs):
    N, D = x.shape
    w = np.zeros(D)
    b = 0

    for i in range(num_epochs):
        for j in range(N):
            indicator = 1 - y[j] * (w@x[j] + b)
            indicator = 1 if indicator > 0 else 0
            w_grad = (1/N) * w - C * indicator * y[j] * x[j]
            b_grad = -C * indicator * y[j]
            w = w - lr * w_grad
            b = b - lr * b_grad

    return w, b
```

Input/Return 설명

- BGD와 동일하다

Code 설명

- Loss를 최소화 하는 w, b를 Stochastic Gradient Descent 사용해서 찾는다

$$L^{(i)}(\mathbf{w}, b) = \frac{1}{2N} \|\mathbf{w}\|^2 + C \cdot \max\left(0, 1 - y^{(i)} \left(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}^{(i)} + b\right)\right)$$

$$\nabla_w L(w, b) = w - C \sum_{i=1}^N \mathbb{I}\left(1 - y^{(i)} (w^T x^{(i)} + b) \ge 0\right) \cdot y^{(i)} x^{(i)}$$

$$\nabla_b L(w, b) = -C \sum_{i=1}^N \mathbb{I}\left(1 - y^{(i)} (w^T x^{(i)} + b) \ge 0\right) \cdot y^{(i)}$$

SVM Prediction

Code 설명

- x: 우리가 예측하고 싶은 데이터
- w, b : 우리가 학습한 파라미터

Classification Rule

- x@w + b 가 0보다 크거나 같다면 1
- 0보다 작으면 -1로 예측
- y_pred: 예측값

$$h(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}) + b$$

Classification rule:

- y = +1 if $h(x) \ge 0$
- y = -1 otherwise

Result

```
In [7]: # Train SVM with BGD
        w, b = svm_train_bgd(x_train, y_train, C, lr, num_epochs)
        print('Weights', w)
        print('Bias ', b)
        # Test accuracy
        preds_test = svm_predict(x_test, w, b)
        test_acc = evaluate(preds_test, y_test)
        print('BGD test accuracy: {:5.2f}%'.format(100.*test acc))
        Weights [-0.18558916 -0.33076923 0.85189816 0.70158907]
                -0.71700000000000005
        Bias
        BGD test accuracy: 95.83%
In [8]: # Train SVM with SGD
        w, b = svm_train_sgd(x_train, y_train, C, lr, num_epochs)
        print('Weights', w)
        print('Bias ', b)
        # Test accuracy
        preds_test = svm_predict(x_test, w, b)
        test_acc = evaluate(preds_test, y_test)
        print('SGD test accuracy: {:5.2f}%'.format(100.*test_acc))
        Weights [-0.18895699 -0.34671336 0.84538791 0.76344282]
                -0.73500000000000005
        Bias
        SGD test accuracy: 95.83%
```

결과 해석

- BGD와 SGD로 구한 w, b 값은 다르지만,
- 둘다 Test Accuracy가 95.83%이다
- Learning Rate와 epoch 수를 조절하면 Accuracy 상향이 가능하다

감사합니다