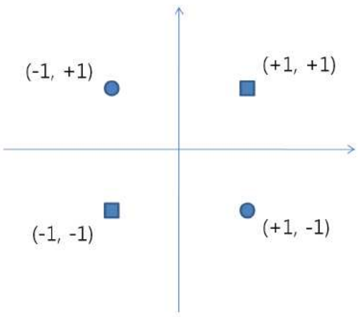
KU KONKUK UNIVERSITY

Support Vector Machine

자연어처리연구실

SVM (Support Vector Machine)

- SVM
  - 데이터들을 커널함수(kernel function)를 이용하여 고차원 공간으로 사상시킨 후 support vector들로 이루어진 초평면을 이용하여 선형 분류하는 마진 기반 기계학습 모델
- 예제: XOR
  - 2차원 XOR 좌표를 이등분하는 초평면을 찾는 문제



커널 함수 (Kernel Function)

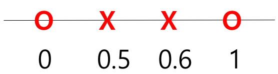
- 커널 함수
  - 저차원 데이터를 고차원 공간으로 사상(mapping)시키는 함수
  - 예제

x (입력)	y (출력)
0	O
0.5	X
0.6	X
1	O

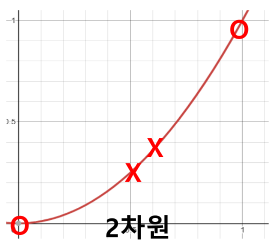
커널 함수

$f(x) = x^2$

x (입력)	f(x)	y (출력)
0	0	O
0.5	0.25	X
0.6	0.36	X
1	1	O



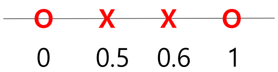
1차원



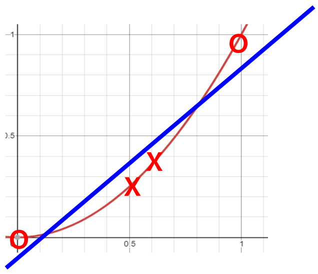
2차원

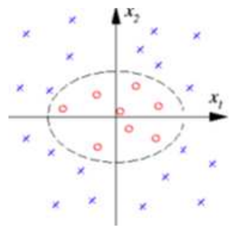
커널 함수 (Kernel Function)

- 커널 함수의 기능
  - 선형 분리 불가능 문제를 선형 분리 가능 문제로 변환
  - 선형 분리 가능 문제 (linear separable problem)
    - 한 개의 직선(초평면)으로 분리할 수 있는 문제

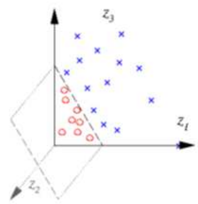


Linear separable? No!



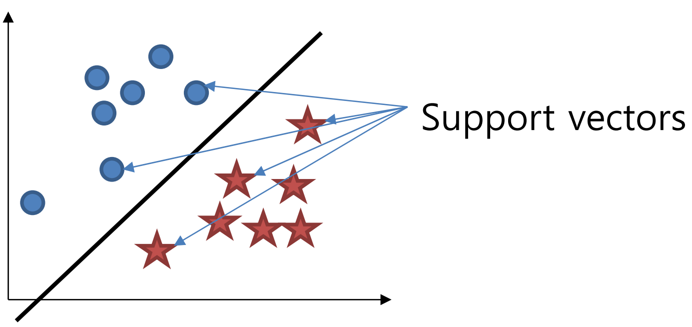


Linear separable? Yes!



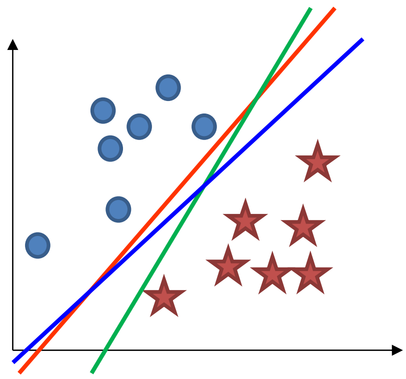
지지 벡터 (Support Vectors)

- SVM
  - 데이터들을 커널함수(Kernel function)를 이용하여 고차원 공간으로 사상시킨 후 support vector들로 이루어진 초평면을 이용하여 선형 분류하는 마진 기반 기계학습 모델
- 지지 벡터
  - 선형 분류(linear classification)의 경계 주변에 존재하는 데이터 포인트들
  - 이진 선형 분류 문제에서는 수많은 support vector들이 존재



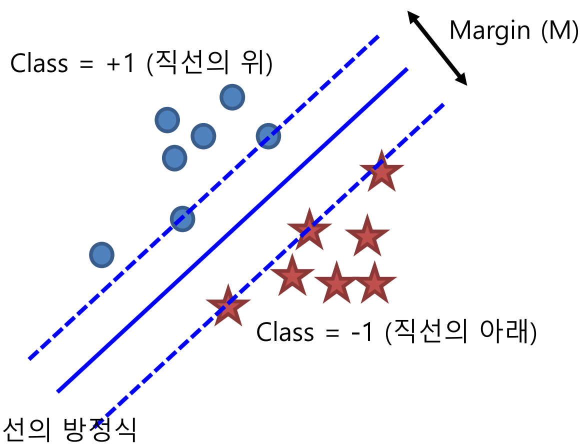
최대 마진 (Maximum Margin)

- SVM
  - 데이터들을 커널함수(Kernel function)를 이용하여 고차원 공간으로 사상시킨 후 support vector들로 이루어진 초평면을 이용하여 선형 분류하는 마진 기반 기계학습 모델
- 최대 마진
  - 선형 분류를 가능하게 하는 직선은 무수히 많이 존재
  - 그 중에서 마진을 최대로 하는 직선이 가장 이상적 임



Which one is the best?
The answer is the blue line.

최대 마진 (Maximum Margin)



직선의 방정식

$wx + b = 0$

(1) 학습 데이터

$\boldsymbol{w}\boldsymbol{x}^{+} + b = +1$

$\boldsymbol{w}\boldsymbol{x}^{-} + b = -1$

$\boldsymbol{x}^{+} = \boldsymbol{x}^{-} + \lambda\boldsymbol{w}$

$|\boldsymbol{x}^{+} - \boldsymbol{x}^{-}| = M$

(2) 수식 유도

$\boldsymbol{w}(\boldsymbol{x}^{-} + \lambda\boldsymbol{w}) + b = 1$

$\boldsymbol{w}\boldsymbol{x}^{-} + b + \lambda\boldsymbol{w}\boldsymbol{w} = 1$

$-1 + \lambda\boldsymbol{w}\boldsymbol{w} = 1$

$\lambda = \frac{2}{\mathbf{w}.\mathbf{w}}$

$M = |\boldsymbol{x}^{+} - \boldsymbol{x}^{-}| = |\lambda\boldsymbol{w}| =$

$= \lambda|\mathbf{w}| = \lambda\sqrt{\mathbf{w}.\mathbf{w}}$

$= \frac{2\sqrt{\mathbf{w}.\mathbf{w}}}{\mathbf{w}.\mathbf{w}} = \frac{2}{\sqrt{\mathbf{w}.\mathbf{w}}}$

$= \frac{2}{\|\vec{w}\|}$

(3) 목적 함수

M을 최대화하는 것 → ||W||를 최소화하는 것!

최적화 문제 (Optimization Problem)

- Primal Problem (주어진 원래 문제)

$F(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} - b$ & $\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - b > 0$ if $y_i = 1$, and

$\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - b < 0$ if $y_i = -1$

minimize: $Q(\mathbf{w}) = \frac{1}{2}||\mathbf{w}||^2$ ← 목적함수: Convex function of w

subject to: $y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - b) = 1, \forall(\mathbf{x}_i, y_i) \in D$ ← 제약조건: Linear in w

★ 주어진 제약하에서 목적함수의 최소값을 구하는 문제? Lagrange function

$$J(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w} \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \{y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - b) - 1\}$$

Lagrange multiplier

w와 b에 대한 최소값 = 정점
→ 미분을 했을 때 기울기가 0인 곳!

$$Condition1: \frac{\partial J(\mathbf{w}, b, \alpha)}{\partial \mathbf{w}} = 0$$

$$Condition2: \frac{\partial J(\mathbf{w}, b, \alpha)}{\partial b} = 0$$

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i, \mathbf{x}_i \quad \& \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i = 0$$

최적화 문제 (Optimization Problem)

- Dual Problem (쌍대 문제)

$$J(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w} \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{m} \alpha_i \{y_i(\mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i - b) - 1\} \quad \& \quad \mathbf{w} = \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i, \mathbf{x}_i} \quad \& \quad \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i} = 0$$

$$J(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2}\mathbf{w} \cdot \mathbf{w} - \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i \mathbf{w} \cdot \mathbf{x}_i} - b\boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i} + \sum_{i=1}^{m} \alpha_i$$

$$w \cdot \boxed{\sum_{i=1}^{m} \alpha_i y_i x_i} = w \cdot w$$

Let $J(\mathbf{w}, b, \alpha) = Q(\alpha)$

$$Q(\alpha) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m} \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j$$

★ w와 b에 대한 최소값 = α 에 대한 최대값!

maximize: $Q(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j \boxed{y_i y_j \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j}$

subject to: $\sum_i \alpha_i y_i = 0$

$\alpha \geq 0$

w가 없어지고 training data에서
얻을 수 있는 것으로 모두 바뀌었다!

최적화 문제 (Optimization Problem)

$$\text{maximize: } Q(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \alpha_i \alpha_j y_i y_j \mathbf{x}_i \mathbf{x}_j$$

$$\text{subject to: } \quad \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

$$\alpha \geq 0$$

☆ Lagrange multiplier → 편미분 ?

제약사항이 부등식이면? 쿤-터커 정리 적용

번호	조건식	풀이
1	$\frac{\partial L}{\partial x_i} = f_i - \sum_{k=1}^{m} \lambda_k g_i^k \leq 0$	라그랑지안 함수를 각 변수 x_i로 편미분한 결과는 극값에서 음이거나 0이어야 한다.
2	$\frac{\partial L}{\partial \lambda_i} = r_i - g^k \geq 0$	라그랑지안 함수를 라그랑지 승수로 편미분한 결과는 비음이어야 한다.
3	$x_i(\frac{\partial L}{\partial x_i}) = x_i(f_i - \sum_{k=1}^{m} \lambda_k g_i^k) = 0$	최적해에서 변수 x_i와 $\frac{\partial L}{\partial x_i}$를 곱한 값이 0이어야 한다.
4	$\lambda_i(\frac{\partial L}{\partial x_i}) = \lambda_i(r_k - g^k) = 0$	최적해에서 변수 λ_i와 $\frac{\partial L}{\partial \lambda_i}$를 곱한 값이 0이어야 한다.
5	$x_i \geq 0$	최적해에서 변수는 비음이어야 한다.
6	$\lambda_i \geq 0$	최적해에서 라그랑지안 승수는 비음이어야 한다.

Finally $F(\mathbf{x}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x} - b$ ⇨ $F(\mathbf{x}) = \sum_i \alpha_i y_i \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x} - b$ 즉, Q(w) = Q(α)

커널 트릭 (Kernel Trick)

- 커널 트릭
  - SVM 함수는 고차원 공간에서의 내적을 통해서 구현

$$F(\mathbf{x}) = \sum_i^m \alpha_i y_i \boxed{\varphi(\mathbf{x}_i) \cdot \varphi(\mathbf{x})} - b$$

고차원 공간으로 사상한 후 내적 수행

  - 고차원 공간으로 사상하고 내적을 구하는 것은 매우 복잡
  - 현재 차원에서 동일한 효과를 거두는 커널 함수를 사용 → 트릭

Mercer의 이론에 따르면 다음 조건을 만족하면 대체 가능

$$\int K(\mathbf{u},\mathbf{v})\psi(\mathbf{u})\psi(\mathbf{v})dxdy \leq 0$$

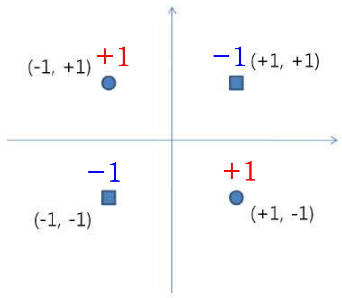
$$\text{where} \int \psi(x)^2 d\mathbf{x} \leq 0$$

⇨

- Polynomial: $K(a,b) = (a \cdot b + 1)^d$
- Radial Basis Function (RBF): $K(a,b) = exp(-\gamma||a-b||^2)$
- Sigmoid: $K(a,b) = tanh(\kappa a \cdot b + c)$

잘 알려진 커널 트릭 함수들!

확인 예제



XOR problem
(선형 분리 불가능)

x_1	x_2	y
-1	-1	-1
-1	+1	+1
+1	-1	+1
+1	+1	-1

커널 트릭 함수

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}_i) = (1+\mathbf{x}\cdot\mathbf{x}_i)^2$$

$$K(\mathbf{x},\mathbf{x}_i) = 1 + x_1^2 x_{i1}^2 + 2x_1x_2x_{i1}x_{i2} + x_2^2 x_{i2}^2 + 2x_1x_{i1} + 2x_2x_{i2}$$

고차원 사상 효과

$$\varphi(\mathbf{x}) = (1, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2)$$

확인 예제

$$\text{maximize: } Q_2(\alpha) = \sum_i \alpha_i - \sum_i \sum_j \alpha_i\alpha_j y_i y_j K(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)$$

$$\text{subject to: } \quad \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

$$C \geq \alpha \geq 0$$

$$Q(\alpha) = \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3+\alpha_4$$
$$-\frac{1}{2}(9\alpha_1^2 - 2\alpha_1\alpha_2 - 2\alpha_1\alpha_3 + 2\alpha 1\alpha_4$$
$$+9\alpha_2^2 + 2\alpha_2\alpha_3 - 2\alpha_2\alpha_4 + 9\alpha_3 - 2\alpha 3\alpha_4 + \alpha_4^2)$$

Lagrange multipliers (각 α의 미분=0)

$$9\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + \alpha_4 = 1$$
$$-\alpha_1 + 9\alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_4 = 1$$
$$-\alpha_1 + \alpha_2 + 9\alpha_3 - \alpha_4 = 1$$
$$\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3 + 9\alpha_4 = 1$$

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \tfrac{1}{8}$$

$$Q(\alpha) = \tfrac{1}{4}$$

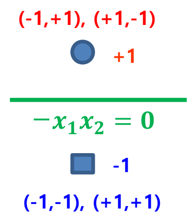
$$\frac{1}{2}||w||^2 = \frac{1}{4}, \quad \text{or} \quad ||w|| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

확인 예제

$\mathbf{w} = \sum \alpha_i y_i \varphi(\mathbf{x}_i)$ & $\boxed{\varphi(\mathbf{x})} = (1, x_1^2, \sqrt{2}x_1x_2, x_2^2, \sqrt{2}x_1, \sqrt{2}x_2)$ & $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \frac{1}{8}$

$$\boxed{w} = \frac{1}{8}[-\varphi(\mathbf{x}_1) + \varphi(\mathbf{x}_2) + \varphi(\mathbf{x}_3) - \varphi(\mathbf{x}_4)]$$

$$= \frac{1}{8}\left[-\begin{bmatrix}1\\1\\\sqrt{2}\\1\\-\sqrt{2}\\-\sqrt{2}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1\\1\\-\sqrt{2}\\1\\-\sqrt{2}\\\sqrt{2}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}1\\1\\-\sqrt{2}\\1\\\sqrt{2}\\-\sqrt{2}\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}1\\1\\\sqrt{2}\\1\\\sqrt{2}\\\sqrt{2}\end{bmatrix}\right] = \begin{bmatrix}0\\0\\-\frac{1}{\sqrt{2}}\\0\\0\\0\end{bmatrix}$$



SVM 함수

$$\mathbf{w} \cdot \varphi(\mathbf{x}) - b = 0 \Rightarrow w \cdot \varphi(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix}0 & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0\end{bmatrix} \begin{bmatrix}1\\x_1^2\\\sqrt{2}x_1x_2\\x_2^2\\\sqrt{2}x_1\\\sqrt{2}_2\end{bmatrix} = 0 \Rightarrow -x_1x_2 = 0$$

SVM에 적합한 문제

- 선형 분류 문제: DT = NN = SVM
- 비선형 분류 문제: NN >= SVM
- 비선형 분류 문제 → 고차원에서의 선형 분류 문제: SVM >>= DT, NN (속도 & 성능)

질의응답

Q&A

Homepage: http://nlp.konkuk.ac.kr
E-mail: nlpdrkim@konkuk.ac.kr