9장 서포트벡터머신



충북대학교 정보통계학과 나 종 화 (cherin@cbnu.ac.kr)

CONTENTS

9.1 서론

9.2 기초 개념



9.1 서론

- 서포트벡터머신(support vector machines, 이하 SVM) 모형은 고차원 또는 무한 차원의 공간에서 초평면(의 집합)을 찾아 이를 이용하여 분류와 회귀를 수행한다.
- SVM은 지도학습기법으로 비-중첩(non-overlapping) 분할을 제공하며 모든 속성(attributes)
 활용하는 전역적(global) 분류 모형이다.
- SVM은 최대 마진을 가지는 선형판별에 기초하며, 속성들 간의 의존성은 고려하지 않는 방법이다.

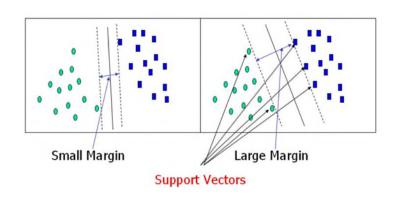


9.2 기초 개념

- 직관적으로 자료를 군집별로 가장 잘 분리하는 초평면은 가장 가까운 훈련용 자료까지의 거리 (이를 마진(margin)이라 함)가 가장 큰 경우이며([그림 9.1]의 (a) 참고), 마진이 가장 큰 초평면을 분류기(classifier)로 사용할 때, 새로운 자료에 대한 오분류가 가장 낮아진다.
- 서포트벡터머신 모형은 선형분류 뿐 아니라, 커널 트릭(kernel trick)이라 불리는 (입력 자료의) 다차원 공간상으로의 맵핑(mapping) 기법을 사용하여 비선형분류도 효율적으로 수행한다 ([그림 9.1]의 (b) 참고).



9.2 기초 개념



Separation may be easier in higher dimensions

feature map separating nyperplane
complex in low dimensions simple in higher dimensions

(a) 선형 분류

(b) 비선형 분류

[그림 9.1] SVM을 이용한 분류



- SVM 알고리즘을 소개하면 다음과 같다.
- d-차원 공간상에 n개의 점으로 구성된 분류 자료를 $D = \{(x_i, y_i), i = 1, 2, ..., n\}$ 이라 하자. y_i 는 단지 두 개의 값(+1 또는 -1)만을 취하는 분류 변수라고 하자.
- 아래의 초평면(hyperplane) h(x)는 d-차원에서 선형판별함수를 제공하며, 원래의 공간을 2개의 반-공간으로 나눈다.

$$h(x) = w^T x + b = w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_d x_d + b.$$

• 위 식에서 w는 d-차원의 가중치 벡터이고 b는 편향(bias) 상수이다. 초평면 상의 점들은 h(x) = 0이다. 즉, 초평면은 $w^t x = -b$ 를 만족하는 모든 점들로 정의된다.



- 만약 자료 집합이 선형으로 분리가 가능한 경우에는 분리초평면은 다음과 같이, h(x) < 0인 모든 점들은 -1의 군집으로, h(x) > 0인 모든 점들은 +1의 군집으로 분류되도록 구해질 수 있다.
- 이 경우 h(x)는 모든 자료에 대해 군집을 예측해주는 선형 분류기 또는 선형판별의 역할을 수행한다.
- 더욱이, 가중치 벡터 w는 초평면에 직교하므로, 그 방향에 수직인 방향을 제공하는 반면, 편향 b는 d-차원 공간에서 초평면의 오프셋(offset)을 고정한다.

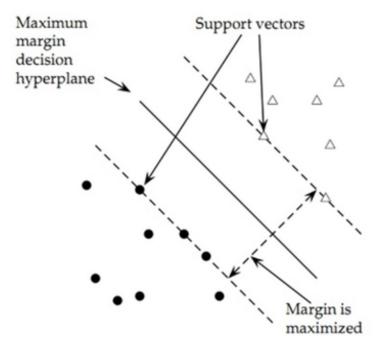


• 분리초평면 h(x) = 0이 주어질 때, 각 자료점 x_i 와 초평면 간의 거리는 다음과 같이 계산가능하다.

$$\delta_i = \frac{y_i h(x_i)}{\|w\|}.$$

• 선형분류기의 마진은 모든 n개의 점에서 분리초평면까지의 최소거리로 정의된다. 이 때, 최소거리를 가지는 모든 점(벡터 x_i^*)들을 선형분류기에 대한 서포트벡터(support vectors)라 한다 ([그림 9.2]). 달리 말하면, 서포트벡터는 분리초평면의 마진 상에 정확히 위치하는 점이다.





[그림 9.2] 선형분류기의 서포트벡터



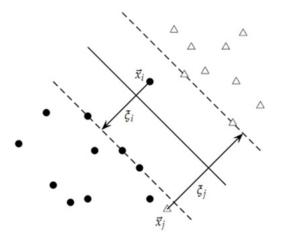
- 초평면의 정준표현(canonical representation)으로, y_i^* 를 가지는 각 서포트벡터에 대해 $y_i^*h(x_i^*)=1$ 이 된다.
- 마찬가지로, 서포트벡터가 아닌 모든 점에 대해 $y_i h(x_i) > 1$ 이 된다. 그 이유는, 정의에 의해, 이 점은 서포트벡터보다 초평면으로부터 더 멀리 떨어져 있기 때문이다. 따라서 모든 자료 $x_i \in D$ 에 대해 $y_i h(x_i) \geq 1$ 이다.
- SVM의 기본 생각은 최대마진을 가지는 초평면을 선택하는 것이다.
- 즉, 최적의 정준 초평면을 찾는 것이다. 이를 위해 모든 가능한 분리초평면 가운데 최대의 마진을
 제공하는 가중치 벡터 w와 편향 b를 찾을 필요가 있다.



- 즉, 그 초평면은 1/||w||을 최대로 하는 것이다. 이 문제는 다음과 같이 선형 제약하에서 ||w||을 최소화 하는 문제와 동등하다.
- 목적함수 : $\min \frac{\|w\|^2}{2}$
- 선형제약: $y_i h(x_i) \ge 1$, $\forall x_i \in D$
- 위의 최적화 문제는 라그랑지승수법(Lagrange multiplier method)(이는 궁극적으로 이차형식의 최적화 문제로 귀결됨)을 이용하여 해결될 수 있다.



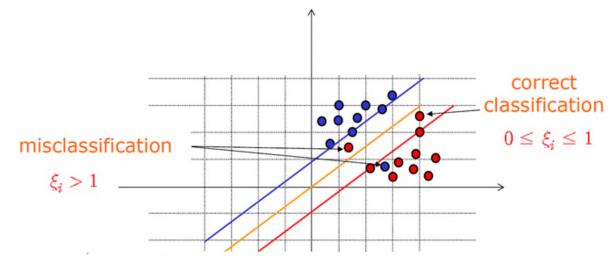
• SVM은, 군집들이 다소간 중복되어 완벽한 분리가 불가능하여 선형적으로 분리가 되지 않는 (linearly non-seperable) 점들도, 각 점 $x_i \in D$ 에 대해 여유변수(slack variables) ξ_i 를 도입하여, 다룰 수 있다([그림 9.3]).



[그림 9.3] 여유변수: 선형적으로 분리가 되지 않는 경우



- 만약 $0 \le \xi_i \le 1$ 이면 그 점은 여전히 정확히 분류되고, 만약 $\xi_i > 1$ 이면 그 점은 오분류된다 ([그림 9.4]).
- 따라서 분류의 목적은 최대 마진을 가지며 동시에 여유변수의 합을 최소로 하는 초평면(w와 b)
 을 찾는 것이다. 이 문제 역시 라그랑지승수법을 통해 해결할 수 있다.



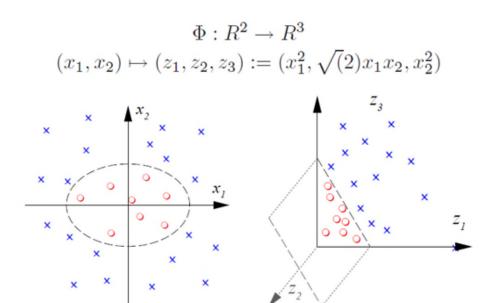




- SVM은 비선형 결정 경계(non-linear decision boundaries)를 가지는 문제도 해결할 수 있다.
- 핵심 아이디어는 원래의 d-차원 공간을 d'-차원(d'>d)으로 맵핑하여 그 점들이 선형적으로 분리 가능하도록 하는 것이다. 원 자료집합 $D=\{(x_i,y_i),i=1,2,...,n\}$ 와 변환함수 Φ 가 주어질 때, 새로운 자료집합은 변환공간에서 $D_{\Phi}=\{(\Phi(x_i),y_i),i=1,2,...,n\}$ 으로 구해진다.



• 다음의 [그림 9.5]는 다항 맵핑을 사용한 예를 보여준다.



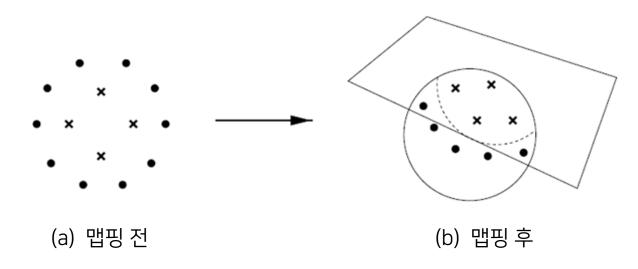
[그림 9.5] 다항 맵핑을 사용한 선형 분리

- 이제 선형결정면(linear decision surface)을 d'-차원에서 구한 후, 이를 다시 원래의 d-차원 공간상의 비선형 면으로 맵핑한다.
- 이 때, 변환된 공간(*d*′-차원) 에서의 선형결정면은

$$f(x) = w \cdot \Phi(x) + b$$

이며, 이 값의 부호를 통해 분류를 수행하게 된다([그림 9.6]).





[그림 9.6] 자료의 맵핑과 선형 결정면



• 이 과정에서 w와 b를 구하기 위해 맵핑된 결과 $\Phi(x)$ 는 별도로 계산될 필요는 없다. 그 이유는 w가 다음과 같이

$$w = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, \Phi(x_i) \quad \text{for some variables } \alpha$$

으로 표현될 수 있음이 밝혀져 있어(Representer 정리, Kimeldorf & Wahba(1971)), w를 직접 최적화하는 대신 α 를 최적화 할 수 있기 때문이다.



• 이 때, 판별규칙은

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \, \Phi(x_i) \cdot \Phi(x) + b$$

이 되며, $K(x_i, x) = \Phi(x_i) \cdot \Phi(x)$ 를 커널함수(kernel function)라 부른다.

- 따라서 변환된 공간에서 요구되는 유일한 연산은 내적(inner product) $\Phi(x_i)^T \Phi(x)$ 으로, 이는 x_i 와 x간의 커널함수(K)와 함께 정의된다.
- 실제 Φ의 선택에 따라 맵핑된 공간의 차원이 매우(무한 차원까지) 커질 수 있어 Φ를 직접 이용 하거나 맵핑된 자료의 내적을 계산하는데 어려움이 있다.



• 이를 극복하는 방법은 다음과 같다. 두 점 p와 q에 대해 맵핑 Φ : $(p_1, p_2) \to (p_1^2, \sqrt{2}p_1p_2, p_2^2)$ 를 적용한 후, 그들의 내적을 계산하면 다음과 같다.

$$\Phi(p) \cdot \Phi(q) = (p_1^2, \sqrt{2}p_1p_2, p_2^2) (p_1^2, \sqrt{2}p_1p_2, p_2^2)^{\mathrm{T}}$$

$$= p_1^2q_1^2 + 2p_1q_1p_2q_2 + p_2^2q_2^2$$

$$= (p_1q_1 + p_2q_2)^2$$

$$= (p \cdot q)^2.$$

• 위 결과로부터 맵핑된 점들 간의 내적은 원 자료의 내적을 계산한 뒤 제곱을 취해 구할 수 있다. 따라서 Φ 함수의 적용 없이 내적 $\Phi(p)\cdot\Phi(q)$ 을 계산할 수 있다. 맵핑 공간에서의 내적과 동등한 함수(equivalent function)를 커널함수라 하고 이를 K라 표현한다.



- SVM에서 통상적으로 사용되는 커널은 다음과 같다.
- 선형(linear) 커널:

$$K(x_i, x_j) = x_i^T x_j$$

• 다항(polynomial) 커널:

$$K(x_i, x_j) = (x_i^T x_j + 1)^q$$
, q: 다항식의 차수

• 가우시안(gaussian) 커널:

$$K(x_i, x_j) = e^{-\frac{\left\|x_i - x_j\right\|^2}{2\sigma^2}}$$
, σ : 퍼진정도(spread) 또는 표준편차



• 가우시안 RBF(gaussian radial basis function) 커널:

$$K(x_i, x_j) = e^{-\gamma \|x_i - x_j\|^2}, \qquad \gamma \ge 0$$

• 라플라스 RBF(Laplace radial basis function) 커널:

$$K(x_i, x_j) = e^{-\gamma ||x_i - x_j||}, \quad \gamma \ge 0$$

• 역탄젠트(hyperbolic tangent) 커널:

$$K(x_i, x_j) = tanh(x_i^T x_j + offset)$$



• 시그모이드(sigmoid) 커널:

$$K(x_i, x_j) = tanh(ax_i^T x_j + offset)$$

• 제1종 베셀함수(the Bessel function of the first kind) 커널:

$$K(x_{i}, x_{j}) = \frac{Bessel_{v+1}^{n}(\sigma || x_{i} - x_{j} ||)}{(||x_{i} - x_{j}||)^{-n(v+1)}}$$



• ANOVA Radial basis 커널:

$$K(x_i, x_j) = \left(\sum_{k=1}^n e^{-\sigma(x_i^k - x_j^k)^2}\right)^a$$

● 일차원의 선형스플라인(linear splines kernel in one dimension) 커널:

$$K(x_i, x_j) = 1 + x_i x_j \min(x_i, x_j) - \frac{(x_i + x_j)}{2} \min(x_i, x_j)^2 + \frac{\min(x_i, x_j)^3}{3}$$



- Karatzoglou 등(2006)에 의하면, 가우시안과 라플라스 RBF, 베셀 커널은 자료에 관한 사전정보가 없을 때 사용되는 일반적-목적의 커널이다.
- 선형커널은 문서분류(text categorization) 등에서 자주 발생하는 대량의 희박 자료벡터를 다 룰 때 유용하다.
- 다항커널은 이미지 처리에 자주 사용되며, 시그모이드 커널은 신경망에 대한 프록시(proxy)로
 주로 사용된다. 스플라인과 ANOVA RBF 커널은 전형적으로 회귀 문제에 잘 수행된다.
- SVM을 수행하는 R 패키지에는 {e1071}, {kernlab}, {klaR}, {svmpath}, {shogun} 등이 있다.
 이 가운데 {e1071} 패키지가 R에서 가장 먼저 소개되었으며 가장 직관적이다.



● 다음의 [예제 1]은 R 패키지 {e1071}의 svm() 함수를 이용하여 SVM 분류를 수행한다.

예제 1 iris 자료를 이용하여 SVM을 수행한다.

- > library("e1071")
- > data(iris)
- svm() 함수를 통해 분류를 수행한다. svm() 함수에는 사용되는 중요 옵션은 다음과 같다.
 - **type**: svm()의 수행 방법(분류, 회귀 또는 novelty detection)을 정한다. 반응변수(*y*) 가 범주형인지의 여부에 따라 정해지며, 디폴트는 C-classification 또는 eps-regression 이다. rm 외에도 nuclassification, one-classification(for novelty detection), nu-regression이 있다.
 - kernel : 훈련과 예측에 사용되는 커널로, "radial" 옵션은 가우시안 RBF를 의미한다. 실제 문제에서 커널의 선택이 결과의 정확도에 큰 영향을 주지는 않는다.



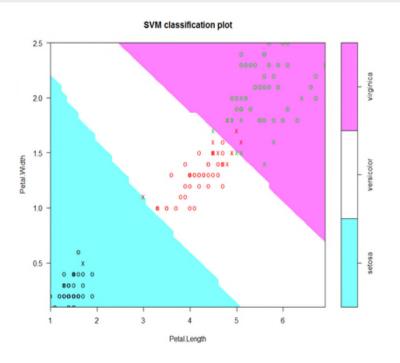
- degree: 다항커널이 사용될 경우의 모수(차수)이다.
- gamma: 선형을 제외한 모든 커널에 요구되는 모수로, 디폴트는 1/(데이터 차원) 이다.
- coef0: 다항 또는 시그모이드 커널에 요구되는 모수로, 디폴트는 0 이다.
- cost: 제약 위배의 비용으로, 디폴트는 1 이다.
- cross: k- 중첩 교차타당도에서 k값을 지정한다.



```
Call:
svm(formula = Species ~ ., data = iris, type = "C-classification",
         kernel = "radial", cost = 10, gamma = 0.1)
Parameters:
   SVM-Type: C-classification
 SVM-Kernel: radial
        cost: 10
       gamma: 0.1
Number of Support Vectors: 32
   ( 3 16 13 )
Number of Classes: 3
Levels:
 setosa versicolor virginica
```

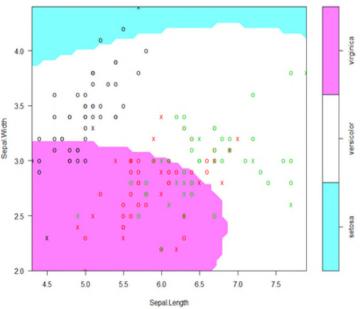


• plot() 함수를 이용하여 그 결과에 대한 시각화 할 수 있다.





```
> plot(svm.e1071, iris, Sepal.Width ~ Sepal.Length,
    slice = list(Petal.Width = 2.5, Petal.Length = 3))
> # slice= 변수가 2개 이상일 때 상수값을 할당함(assign)
> # 아래 그림에서 x: 서포트벡터, o:데이터 점을 나타냄
```





● 분류된 데이터를 실제 값과 비교해보면 setosa는 50개 모두 잘 분류 되었고, versicolor은 50개 중 47개가 잘 분류되었으며 virginica는 50개 모두 잘 분류되었다.



● classAgreement() 함수를 통해 모형의 정확도를 확인할 수 있다.

```
> classAgreement(acc)
$diag
[1] 0.98

$kappa
[1] 0.97

$rand
[1] 0.9739597

$crand
[1] 0.941045
```



tune() 함수는 제공된 모수 영역에서 격자 탐색을 사용하여 통계적 방법의 초모수
(hyperparameters)를 조절(tune)할 수 있다. 이 함수는 최적의 모수를 제공해 주며, 동시에 여러
 모수 값에 대한 검정에 대한 자세한 결과를 제공해 준다.



```
- best performance: 0.03333333
- Detailed performance results:
  gamma cost
                 error dispersion
1 1e-06 10 0.78666667 0.07568616
2 1e-05 10 0.78666667 0.07568616
3 1e-04
         10 0.63333333 0.15153535
4 1e-03
         10 0.10666667 0.10976968
5 1e-02
         10 0.04000000 0.04661373
6 1e-01 10 0.04000000 0.04661373
7 1e-06 100 0.78666667 0.07568616
         100 0.63333333 0.15153535
8 1e-05
9 1e-04
         100 0.10000000 0.10999439
10 1e-03 100 0.04000000 0.04661373
11 1e-02 100 0.03333333 0.04714045
12 1e-01
         100 0.04666667 0.04499657
```



● 다음의 [예제 2]는 R 패키지 {kernlab}의 ksvm() 함수를 이용하여 SVM 분류를 수행한다.

예제 2 iris 자료를 이용하여 SVM을 수행한다.



```
Gaussian Radial Basis kernel function.
   Hyperparameter : sigma = 0.1

Number of Support Vectors : 32

Objective Function Value : -5.8442 -3.0652 -136.9786
Training error : 0.02
Probability model included.
```

• plot() 함수를 이용하여 분류된 결과에 대한 각 변수별 분포를 상자그림의 형태로 나타낼 수 있다.



```
> plot(fit, iris[,2], main="Sepal.Width")
> plot(fit, iris[,3], main="Petal.Length")
> plot(fit, iris[,4], main="Petal.Width")
                                                         Sepal.Length
                                                                                        Sepal.Width
> par(mfrow=c(1,1))
                                               7.5
                                                                             4.0
                                               7.0
                                                                             3.5
                                               6.0
                                                                             3.0
                                               5.5
                                               5.0
                                                                             2.5
                                                                             2.0
                                                     setosa
                                                           versicolor
                                                                   virginica
                                                                                   setosa
                                                                                          versicolor
                                                          Petal.Length
                                                                                        Petal.Width
                                                                             2.0
                                                                             1.5
                                                                             1.0
                                                                             0.5
                                                     setosa
                                                           versicolor
                                                                                                  virginica
```



```
> head(predict(svm.kernlab, iris, type= "probabilities"))
> # type= "probabilities", "decision", "response", "votes"
           setosa versicolor virginica
[1,] 0.982512676 0.0107155952 0.006771729
[2,] 0.976761862 0.0155766815 0.007661456
 [3,] 0.984482548 0.0088730948 0.006644357
 [4,] 0.980694369 0.0116272964 0.007678335
[5,] 0.983721897 0.0096395760 0.006638527
 [6,] 0.969339542 0.0213361722 0.009324286
> head(predict(svm.kernlab, iris, type = "decision"))
> # 3개의 이진분류기의 decision value
            [,1] \qquad [,2]
                                   [,3]
[1,] -1.3982580 -1.1850725 -4.22358404
 [2,] -1.2750649 -1.1486247 -4.22523983
[3,] -1.4603977 -1.1910251 -3.88688364
[4,] -1.3718116 -1.1492030 -3.78283230
[5,] -1.4330830 -1.1910482 -3.93300606
[6.] -1.1710980 -1.0910910 -3.83914172
```



predict() 함수를 통해 새로운 자료에 대한 분류(예측)을 수행 할 수 있다. 여기서는 모형 구축에 사용된 자료를 재사용하여 분류를 수행하였다. 그 결과 setosa와 viginica는 50개 모두, versicolor는 50개 중 47개가 제대로 분류되었다.



다음의 [예제 3]은 R 패키지 {e1071}의 svm() 함수를 이용하여 서포트벡터회귀(SVR)를 수행한다.

예제 3 svm() 함수를 통해 SVR을 수행하고, 모수 조절(tuning)을 통해 성능을 제고한다.

```
> # 분석용 자료 생성
> x <-c(1:20)
> y <- c(3,4,8,4,6,9,8,12,15,26,35,40,45,54,49,59,60,62,63,68)
> data<-data.frame(x, y)
```



● SVR과의 비교를 위해 Im() 함수를 통해 단순회귀를 적합한다. 그 결과 $RMSE \approx 5.70$ 을 얻었다.

```
> plot(data, pch=16)
> model <- lm(y ~ x, data)
> abline(model)

> lm.error <- model$residuals # same as data$Y - predictedY
> (lmRMSE <- sqrt(mean(lm.error^2)))
[1] 5.703778</pre>
```



• svm() 함수를 통해 SVR을 수행하고, 그 결과를 단순회귀 결과와 함께 그린다. SVR의 $RMSE \approx 3.16$ 으로 단순회귀에 비해 감소되었음을 알 수 있다.



- SVR의 성능을 높이기 위해 모델의 모수들을 최적화 할 필요가 있다. 적용된 svm() 함수는 디폴트로 ε-회귀(type=eps-regression 옵션)가 적용되었으며, ε 값은 디폴트로 0.1이 사용되었다. 과적합(overfitting)을 피하기 위해 cost 모수(cost= 옵션)를 변경할 수 있다.
- 이러한 모수의 선택과정을 초모수 최적화(hyperparameter optimization) 또는 모형 선택 (model selection)이라 부른다.
- 모수 ε과 cost의 다양한 값에 대해, 격자탐색을 수행하여, 최적의 모수를 찾는다.
- 이 예제에서는 총 88개의 모형에 대해 훈련이 수행되었다. 그 결과 최적의 모수로 ε=0,
 cost=256이 선택되었다.

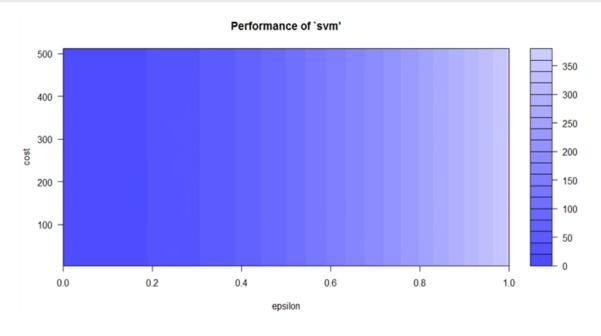


● tune() 함수는 각 모형에 대한 MSE 값을 제공한다(제곱근을 취해 RMSE값을 구할 수 있다).



plot() 함수를 통해 RMSE 값을 시각화 하면 다음과 같다. 이 그림에서 색이 짙을수록 RMSE가
 0에 가까우므로 더 나은 모형임을 의미한다.

> plot(tuneResult)





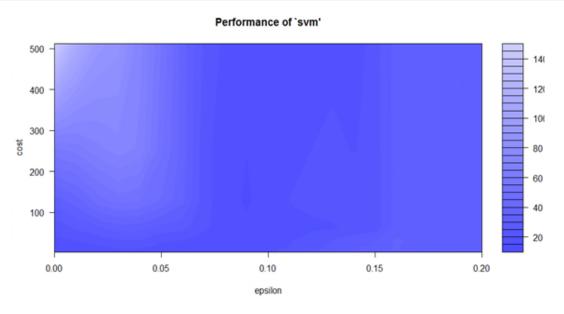
보다 정교한 모수 tuning을 위해 보다 좁은 영역에서 격자탐색을 실시한다. 위 그림에서 cost
 모수의 영향은 크지 않으므로 그 값을 그대로 유지하였다. 총 168개의 모형에 대해 훈련하였다.

```
> tuneResult <- tune(svm, y ~ x, data=data,
ranges = list(epsilon=seq(0,0.2,0.01), cost=2^(2:9))) # 168개 모수 조합

> print(tuneResult)
Parameter tuning of 'svm':
- sampling method: 10-fold cross validation
- best parameters:
epsilon cost
    0.09 128
- best performance: 14.27824
```



> plot(tuneResult)



위의 그림에서 진한 영역을 자세히 볼 수 있으며, 그 결과 ε=0.09, cost=128인 모형이 최소의
 오차를 가지는 것을 알 수 있다.



다행히도 최적의 모형을 분석자가 찾아낼 필요는 없다. R에서는 다음과 같이 매우 쉬운 방법으로 최적의 모형이 제공되며, 이를 통해 예측을 수행할 수 있다.

```
> tunedModel <- tuneResult$best.model
> tpred.y <- predict(tunedModel, data)
> error <- data$y - tpred.y
> tsvmRMSE <- sqrt(mean(error^2))
> tsvmRMSE
[1] 2.072399
```

• 위 결과에서 $RMSE \approx 2.07$ 로 모형의 성능이 크게 개선되었음을 알 수 있다.



모수에 대한 조절(tuning) 전과 후의 SVR을 적합한 결과를 그림으로 그려보면 다음과 같다.
 그림에서 푸른색은 모수 조절된 SVR 적합 결과이다.

```
> plot(data, pch=16)
> points(data$x, pred.y, col = "red", pch=4, type="b")
> points(data$x, tpred.y, col = "blue", pch=4, type="b")
```

