MC884/MO444 - Aprendizado de Máquina

Support Vector Machines e validação cruzada

 $Erik\ de\ Godoy\ Perillo\ -\ RA135582$

Universidade Estadual de Campinas

4 de outubro de 2016

1 Introdução

O objetivo do trabalho era experimentar com a técnica de SVM^1 e sua validação por meio de k-folds com busta de hiperparâmetros por $grid\ search$.

1.1 Implementação

A linguagem de implementação escolhida foi o R. Todo o código utilizado no relatório encontra-se na seção 3. Ao longo do documento, linhas do código serão citadas para referência no mesmo. A função main (linha 130 da seção 3) executa todos os itens em ordem, mostrando os resultados.

2 Enunciado

Treine um SVM com kernel RBF nos dados do arquivos. A validação externa deve ser 5-fold estratificado. Para cada conjunto de treino da validação externa faça um 3-fold para escolher os melhores hiperparametros para C (cost) e γ (gamma). Faça um grid search para C nos valores $2^{-5}, 2^{-2}, 2^0, 2^2, 2^5$ e gamma nos valores $2^{-15}, 2^{-10}, 2^{-5}, 2^0, 2^5$.

Os valores especificados para os folds, C e γ são declarados das linhas 9 a 15 do código na seção 3. A função que faz o grid search está declarada na linha 28 do código. Ela faz a procura da melhor combinação de parâmetros C e γ .

A função que, dados os dados e o número de folds, procura os melhores parâmetros C e γ entre os k possíveis folds (fazendo grid search em cada um deles) é a $get_best_svm_params$, declarada na linha 57.

Além dessa procura de melhor combinação entre 3 folds e os hiperparâmetros, pede-se que esses 3 folds venham de 5 folds externos. A função que finalmente faz todas essas partes, além de estimar a acurácia média do sistema, é declarada como mean_accuracy_estimate na linha 101 do código.

Na função main da linha 130 são feitos os dois passos principais pedidos: primeiro, a acurácia é estimada na linha 147. Depois, os parâmetros finais para o sistema são escolhidos na linha 159.

A saída do código todo sendo executado pela main encontra-se na seção 4.

2.1 Perguntas

1. Qual a acurácia média na validação de fora?

A acurácia média, como indica a linha 43 da saída na seção 4, é de 92.44%.

2. Quais os valores de C e γ a serem usados no classificador final? (fazer 3-fold no conjunto todo)

Usando-se o 3-fold, obtivemos, como a linha 56 da saída indica, os parâmetros finais:

$$C = 4, \ \gamma = 0.031250$$

¹do inglês: Support Vector Machines

3 Código-fonte

```
library(caret)
   library(e1071)
   #default values:
   #file path of data
data_filepath <- "data1.csv"</pre>
   #k for external k-fold
   ext_k <- 5
10
   #k for internal k-fold
11 inn_k <- 3
   #cost parameters
   cost_params <- c(2^-5, 2^-2, 2^0, 2^2, 2^5)
   #gamma parameters
   gamma_params <- c(2^-15, 2^-10, 2^-5, 2^0, 2^5)
15
   #wrapper for sprintf
17
18
   printf <- function(...) cat(sprintf(...))</pre>
   #calculates accuracy of prediction
   accuracy <- function(pred_y, y, thresh=0.5)
23
     pred_y <- as.numeric(pred_y >= thresh)
24
     return (sum(pred_y == y)/length(y))
25
26
27
   #performs grid search to find best C and gamma for svm
   grid_search <- function(x_train, y_train, x_test, y_test, costs, gammas) {
28
30
     best_cost <- cost_params[1]</pre>
     best_gamma <- gamma_params[1]
31
     max_accuracy <- 0.0
32
33
34
     for(cost in costs)
35
36
       for(gamma in gammas)
37
38
         model <- svm(x_train, y_train, cost=cost, gamma=gamma,
   kernel="radial")
39
40
41
          y_pred <- predict(model, x_test)</pre>
42
43
          acc <- accuracy(y_pred, y_test)</pre>
44
45
          if(acc > max_accuracy)
46
47
            max_accuracy <- acc
best_cost <- cost</pre>
48
            best_gamma <- gamma
49
          }
50
51
52
53
54
     return (c(best_cost, best_gamma, max_accuracy))
55
56
   #gets best svm parameters (C, gamma) within given folds
57
   get_best_svm_params <- function(x, y, num_folds, costs, gammas)</pre>
58
59
     folds <- createFolds(y, k=num_folds)</pre>
60
61
62
     max_accuracy <- 0.0
63
     best_cost <- costs[1]</pre>
     best_gamma <- gammas[1]
64
65
     for(fold in folds)
```

```
68
         printf("fold n. %d: ", count)
 69
 70
        x_train <- x[-fold, ]</pre>
 71
        x_test <- x[fold, ]</pre>
 72
        y_train <- y[-fold]
 73
        y_test <- y[fold]
 74
75
        params <- grid_search(x_train, y_train, x_test, y_test, costs, gammas)</pre>
 76
77
         cost <- params[1]</pre>
         gamma <- params[2]
 78
         acc <- params[3]
 79
 80
         printf("cost=%f, gamma=%f, accuracy=%.2f%%", cost, gamma, 100*acc)
 81
         if(acc > max_accuracy)
 82
          printf("(best so far!)")
 83
           max_accuracy <- acc
best_cost <- cost
 84
 85
 86
           best_gamma <- gamma
 87
 88
        printf("\n")
 89
 90
        count <- count + 1
 91
 92
 93
       printf("\t----\n")
       printf("\tbest cost: %f, best gamma: %f, max accuracy: %.2f%%\n",
 94
 95
        best_cost, best_gamma, 100*max_accuracy)
 96
 97
      return (max_accuracy)
 98
    }
 99
100
    \#k\text{-fold} inside a k\text{-fold}. used to estimate accuracy of svm
101
    mean_accuracy_estimate <- function(x, y, num_external_folds, num_inner_folds)</pre>
102 {
103
      #preparing data
104
      ext_folds <- createFolds(y, k=num_external_folds)</pre>
105
106
       ext_count <- 1
107
       max_accuracies <- c()</pre>
108
109
       for(ext_fold in ext_folds)
110
        printf("external fold n. %d:\n", ext_count)
111
112
113
        x_test <- x[ext_fold, ]</pre>
        y_test <- y[ext_fold]
x_train <- x[-ext_fold, ]
y_train <- y[-ext_fold]
114
115
116
117
118
        max_acc <- get_best_svm_params(x_train, y_train, inn_k,</pre>
         cost_params, gamma_params)
max_accuracies <- c(max_accuracies, max_acc)
119
120
121
122
         ext_count <- ext_count + 1
123
        printf("\n")
124
125
      printf("mean of maximum accuracies: %.2f%%\n", 100*mean(max_accuracies))
126
127 }
128
129
    #main method for whole challenge
130 main <- function()
131 {
132
      #reading data
133
      data <- read.csv(data_filepath)</pre>
134
      x <- data[, 1:ncol(data)-1]
      y <- data[, ncol(data)]
```

```
136
      printf("ESTIMATING ACCURACY:\n")
137
      printf("\texternal k-folds: %d\n\tinner k-folds: %d\n\tcosts: ",
138
139
        ext_k, inn_k)
140
      print(cost_params)
141
      printf("\tgammas: ")
      print(gamma_params)
printf("\ttotal iterations: %d\n\n",
142
143
144
        length(cost_params)*length(gamma_params)*ext_k*inn_k)
145
146
      #estimating accuracy for classifier
      mean_accuracy_estimate(x, y, ext_k, inn_k)
147
148
      printf("\n-----
printf("GETTING FINAL CLASSIFIER:\n")
149
150
      printf("\tk-folds: %d\n\tcosts: ", inn_k)
print(cost_params)
151
152
153
      printf("\tgammas:")
      print(gamma_params)
printf("\ttotal iterations: %d\n\n",
154
155
156
        length(cost_params)*length(gamma_params)*inn_k)
157
158
159 params <- get_best_svm_params(x, y, inn_k, cost_params, gamma_params)
160 }
      #final classifier
```

4 Saída do código

```
TIMATING ACCURACY:
 2
             external k-folds: 5
            inner k-folds: 3
             costs: [1] 0.03125 0.25000 1.00000 4.00000 32.00000
            gammas: [1] 3.051758e-05 9.765625e-04 3.125000e-02 1.000000e+00 3.200000e+01
 6
             total iterations: 375
   external fold n. 1:
   fold n. 1: cost=1.000000, gamma=0.031250, accuracy=92.13% (best so far!) fold n. 2: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=86.61%
   fold n. 3: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=91.34%
            best cost: 1.000000, best gamma: 0.031250, max accuracy: 92.13%
15
   external fold n. 2:
   fold n. 1: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=85.04\% (best so far!)
   fold n. 2: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=91.34% (best so far!) fold n. 3: cost=1.000000, gamma=0.031250, accuracy=91.34%
            best cost: 4.000000, best gamma: 0.031250, max accuracy: 91.34%
   external fold n. 3:
   fold n. 1: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=85.83% (best so far!) fold n. 2: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=93.70% (best so far!) fold n. 3: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=87.40%
            best cost: 32.000000, best gamma: 0.000977, max accuracy: 93.70%
28
   external fold n. 4:
   fold n. 1: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=93.70\% (best so far!)
   fold n. 2: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=88.19\%
32
   fold n. 3: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=90.55%
            best cost: 4.000000, best gamma: 0.031250, max accuracy: 93.70%
35
   external fold n. 5:
fold n. 1: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=85.71% (best so far!)
36
37
   fold n. 2: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=91.34% (best so far!) fold n. 3: cost=32.000000, gamma=0.000977, accuracy=90.55%
40
41
            best cost: 4.000000, best gamma: 0.031250, max accuracy: 91.34%
42
43
   mean of maximum accuracies: 92.44%
44
45
46
   GETTING FINAL CLASSIFIER:
47
            k-folds: 3
48
            costs: [1] 0.03125 0.25000 1.00000 4.00000 32.00000
49
            50
            total iterations: 75
51
52
   fold n. 1: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=93.04% (best so far!)
53
   fold n. 2: cost=4.000000, gamma=0.031250, accuracy=88.68%
   fold n. 3: cost=1.000000, gamma=0.031250, accuracy=89.94\%
55
            best cost: 4.000000, best gamma: 0.031250, max accuracy: 93.04\%
```