B 6 4 E HarrisvM

2. 外務於理工工用數學 至知其身份 義

还可以对 SVM 运用 tune () 函数,即使用交叉验证来选择径向核函数最优的 γ 值以及 cost

```
> tune.out=tune(svm, y~., data=dat[train,], kernel="radial",
   ranges=list(cost=c(0.1,1,10,100,1000), kernel="raulogamma=c(0.5,1,2,3.4)))
> summary(tune.out)
Parameter tuning of symi:
- sampling method: 10-fold cross validation
- best parameters: 10-rold cross validation cost gamma
- best performance: 0.12
- Detailed performance results:
   cost gamma error dispersion
             0.27
                    0.1160
                                There is no mark and the second of the
         0.5 0.13
 1e+00
                    0.0823
                                0.5 0.15
  1e+01
                    0.0707
 1e+02 0.5 0.17
                    0.0823
         0.5 0.21
 1e+03
                         20 教育文化 生态类数数数别 原代 医生气性
                    0.0994
 1e-01
        1.0 0.25 0.1354
         1.0 0.13
  1e+00
                    0.0823
```

因此,最优的选择为 cost =1 和 gamma =2。使用 prediction () 函数可以查看这个模型在测 试集上的预测结果。注意到,在这个过程中,以-train为索引集把数据框 dat 分成子集。

> table(true=dat[-train, "y"], pred=predict(tune.out\$best.model, newx=dat[-train,]))

这个 SVM 误分了 39% 的测试观测。

# ROC 曲线 9.6.3



ROCR 包可以用来生成图 9-10 和图 9-11 中的 ROC 曲线。为了画出 ROC 曲线, 首先需生成 一个函数,这个函数能够在给定的包含每个观测数值得分的 pred 向量和包含每个观测真实类 别的 truth 向量前提下,画出 ROC 曲线。

- > library(ROCR)
- > rocplot=function(pred, truth, ...){
- predob = prediction(pred, truth)
  perf = performance(predob, "tpr", "fpr")
- plot(perf,...)}

A 1 1

SVM 和支持向量分类器会输出每个观测的预测的类别标签。但是,获得每个观测的拟 合值 (fitted value) 也是可能的,而拟合值正是用来获得类别标签的数值得分。例如,在支 持向量分类器中,观测  $X=(X_1,X_2,\cdots,X_p)^{\mathsf{T}}$  的拟合值的形式为 $\hat{\beta}_0+\hat{\beta}_1X_1+\hat{\beta}_2X_2+\cdots+\hat{\beta}_pX_p$ 。 对于非线性核函数的 SVM, 计算拟合值的式子为式 (9.23)。从本质上来说, 拟合值的符号 决定了观测落在决策边界的哪一侧。因此,对于一个给定的观测来说,拟合值和预测类别 的关系是非常简单的:如果拟合值大于0,那么观测就被分成第一类,如果拟合值小于0, 则观测被分为另一类。为了得到一个给定的 SVM 模型的拟合值,在拟合 svm ()的时候使用 decision. value = TRUE。然后 predict () 函数会输出拟合值。

- > svmfit.opt=svm(y~., data=dat[train,], kernel="radial", gamma=2, cost=1,decision.values=T) > fitted=attributes(predict(svmfit.opt,dat[train,],decision.
  - values=TRUE))\$decision.values

### 接下来就可以画 ROC 曲线了。

- > par(mfrow=c(1,2))
- > rocplot(fitted,dat[train,"y"],main="Training Data")

SVM 似乎能给出精确的预测。但是增加 y 可以更加光滑地拟合数据,并且进一步提高预测的 准确度。

- > svmfit.flex=svm(y~., data=dat[train,], kernel="radial", gamma=50, cost=1, decision.values=T)
- > fitted=attributes(predict(svmfit.flex,dat[train,],decision. values=T))\$decision.values
- > rocplot(fitted,dat[train,"y"],add=T,col="red")

然而这些都是训练数据的 ROC 曲线。通常我们更关注测试数据的预测的精度。根据测试 数据的 ROC 曲线来评价,γ=2 的模型似乎能够提供更准确的预测结果。

- > fitted=attributes(predict(svmfit.opt,dat[-train,],decision. values=T)) \$decision.values
- > rocplot(fitted,dat[-train,"y"],main="Test Data")
- > fitted=attributes(predict(svmfit.flex,dat[-train,],decision. values=T)) \$decision.values
- > rocplot(fitted,dat[-train,"y"],add=T,col="red")

#### 9. 6. 4 多分类的 SVM

如果响应因子的水平数超过2, 那么 svm()函数就会使用"一类对一类" 类。首先生成第三类观测来了解这种情况。

- > set.seed(1)
- > x=rbind(x, matrix(rnorm(50\*2), nco1=2))
- > y=c(y, rep(0,50))
- > x[y==0,2]=x[y==0,2]+2
- > dat=data.frame(x=x, y=as.factor(y))
- > par(mfrow=c(1,1))
- > plot(x,col=(y+1))

## 现在用 SVM 来拟合这个数据:

- > svmfit=svm(y~., data=dat, kernel="radial", cost=10, gamma=1)
- > plot(symfit, dat)

如果输入函数 svm()的响应变量是数值变量而不是因子变量的话, e1071 库也可以用来 做支持向量回归。

# 9.6.5 基因表达数据的应用

以下分析都使用 Khan 数据集,这个数据集由许多组织样本构成,这些样本对应四种不同 的蓝色小圆细胞肿瘤。对于每个组织样本,基因表达测定都是可用的。数据集由训练数据 xtrain 和 ytrain, 以及测试数据 xtest 和 ytest 组成。

首先看数据的维数:

```
9.6 实验:支持向量机 ◆ 255
   > library(ISLR)
   > names (Khan)
   [1] "xtrain" "xtest"
  > dim(Khan$xtrain)
                       "ytrain" "ytest"
   [1]
       63 2308
   > dim(Khan$xtest)
   [1]
        20 2308
   > length (Khan$ytrain)
   [1] 63
   > length(Khan$ytest)
   [1] 20
数据集由 2 308 个基因的表达测定组成。训练集和测试集分别由 63 和 20 个观测组成。
    8 23 12 20
   > table(Khan$ytest)
   1 2 3 4
   3 6 6 5
对基因表达测定数据,使用支持向量机方法来预测癌症亚型。在这个数据集中,相对于观测的
数目来说,特征的数目非常多。基于这一特点建议使用线性核函数,因为使用多项式核函数和
径向核函数得到更高光滑性是没有必要的。
   > dat=data.frame(x=Khan$xtrain, y=as.factor(Khan$ytrain))
   > out=svm(y~., data=dat, kernel="linear",cost=10)
   > summary(out)
   svm(formula = y \sim ., data = dat, kernel = "linear",
       cost = 10)
   Parameters:
      SVM-Type: C-classification
    SVM-Kernel: linear
         cost: 10
         gamma: 0.000433
   Number of Support Vectors: 58
    ( 20 20 11 7 )
   Number of Classes: 4
   Levels:
    1 2 3 4
   > table(out$fitted, dat$y)
        1 2 3
               4
       8 0 0 0
     1
       0 23 0 0
     2
     3 0 0 12 0
    结果显示,训练集的误差为0。事实上,这并不奇怪,因为相对于观测的数目来说,变量
        0 0 0 20
的数目较多意味着很容易找到把这些类别完全分开的超平面。我们最关注的并不是支持向量分
类器在训练观测上的分类效果,而是在测试观测上的分类效果。
```

> dat.te=data.frame(x=Khan\$xtest, y=as.factor(Khan\$ytest)) > pred.te=predict(out, newdata=dat.te)

```
> table(pred.te, dat.te$y)
pred.te 1 2 3 4
      1 3 0 0 0
      20620
      3 0 0 4 0
      4 0 0 0 5
```