Librerie in R per le Support Vector Machines e loro utilizzo Corso di Modellizzazione Statistica, prof. M. Bilancia

Michele Di Nanni, mat. 729187

1.1 Il package e1071 - caso lineare

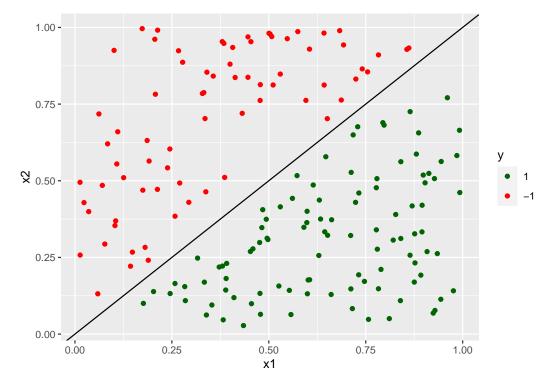
Per poter utilizzare le *support vector machines* in R, possiamo utilizzare il package **e1071**. Se quest'ultimo non è installato sulla propria macchina, procediamo ad installarlo in R tramite il comando:

```
install.packages("e1071")
```

Dopo aver eseguito tale comando, andiamo ad importare il package per poterci lavorare:

```
library(e1071)
library(ggplot2) #libreria che include ggplot2 per la visualizzazione dei dati
```

Procediamo a mostrare un primo utilizzo della libreria, utilizzando un dataset creato in maniera artificiosa ai fini illustrativi. Il task che andremo a considerare adesso sarà quello di separabilità lineare a due classi:



Ora procediamo ad effettuare uno splitting train/test con percentuale 75% / 25%:

```
library(caret)
set.seed(1)
inTrain <- createDataPartition(y = df_thresholded$y, p = .75, list = FALSE)
training <- df_thresholded[ inTrain, ]
testing <- df_thresholded[ -inTrain, ]</pre>
```

A questo punto procediamo ad utilizzare il metodo sv \mathbf{m} della libreria e1071, con kernel lineare. Il metodo sv \mathbf{m} contiene differenti parametri, di seguito sono spiegati uno ad uno quelli utilizzati:

- 1. formula: ci permette di specificare variabili indipendenti e dipendenti
- 2. data: si riferisce ai dati passati in input per la classificazione
- 3. **type**: attraverso questo parametro possiamo settare il tipo di classificazione/regressione desiderata; difatti il parametro può assumere valore *C-classification* (come nel seguente esempio), *nu-classification* per indicare la classificazione basata sul parametro $\nu \in [0, 1]$, *one-classification* per effettuare rilevamento di *outlier*, *eps-regression* e *nu-regression* per quanto riguarda tasks di regressione
- 4. **kernel**: ci permette di impostare quale tipo di kernel vogliamo utilizzare(in questo caso stiamo utilizzando un kernel lineare); altri valori del parametro che denotano un kernel valido sono poly (kernel polinomiale), radial, sigmoid
- 5. **cost**: attraverso tale parametro possiamo impostare il livello di complessità del modello(infatti, se quest'ultimo coincide con un valore molto basso potremmo ricadere in *underfitting*, se invece abbiamo una valore molto alto potremmo ricadere in *overfitting*)
- 6. scale: indica se occorre riscalare o meno le variabili

```
Call:
svm(formula = y ~ ., data = training, type = "C-classification",
    kernel = "linear", cost = 1, scale = F)

Parameters:
    SVM-Type: C-classification
SVM-Kernel: linear
    cost: 1

Number of Support Vectors: 51

( 25 26 )

Number of Classes: 2

Levels:
```

Da questo output possiamo osservare di quanto, con un valore di C pari a 1 abbiamo un numero pari a 51 vettori di supporto.

Visualizziamo adesso i primi sei vettori di supporto:

head(svm_model\$SV)

```
x1 x2
2 0.3721239 0.2186453
3 0.5728534 0.5167968
31 0.4820801 0.3472307
33 0.4935413 0.3744869
37 0.7942399 0.6894134
42 0.6470602 0.5783539
```

1 25 0 -1 0 18

A questo punto andiamo a valutare la accuratezza del modello sul test set:

```
#accuratezza sul test set valutata
pred = predict(svm_model, testing)
table(predicted = pred, true = testing$y)

true
predicted 1 -1
```

Possiamo notare di come la accuratezza sia pari a 1. Non abbiamo errori di predizione in questo caso molto idealizzato.

Un metodo molto utile che ci permette di comprendere quali siano i parametri migliori da settare per il modello è il metodo tune() che effettua di default una 10-fold cross validation. Tale metodo ci permette di visualizzare anche quale sia il modello migliore ottenibile, attraverso:

```
Call:
best.svm(x = y ~ ., data = training, kernel = "linear", scale = F,
    C = 10)

Parameters:
    SVM-Type: C-classification
SVM-Kernel: linear
    cost: 1

Number of Support Vectors: 51
( 25 26 )
```

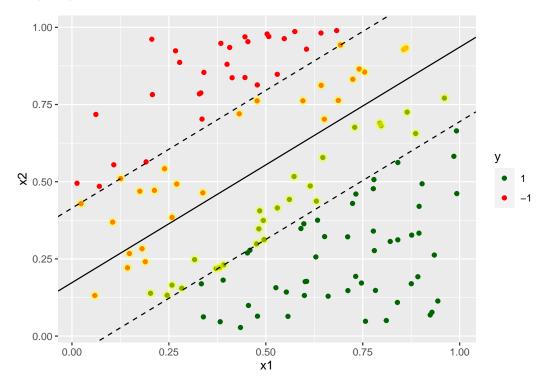
Number of Classes: 2

Levels:

1 -1

Come possiamo evincere da quanto ottenuto, il miglior modello prevede il parametro di costo C pari ad 1.

Per poter rappresentare la retta di separazione ottimale, occorre calcolare i parametri \mathbf{w} e w_0 , rispettivamente la pendenza(slope) e l' intercetta, in quanto la retta sarà definita come: $y = \mathbf{w}^T x + w_0$.

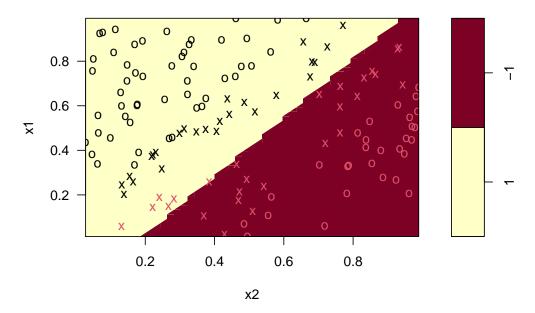


I punti cerchiati in giallo corrispondono ai vettori di supporto.

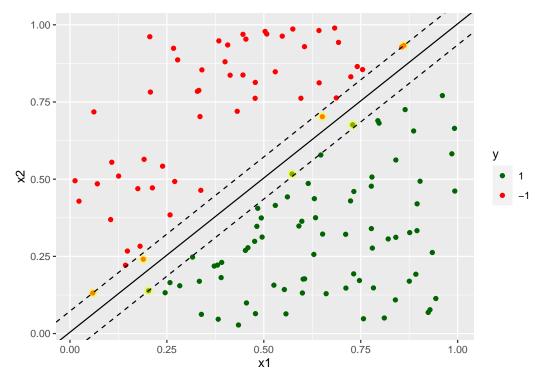
Un' altra modalità che ci permette di visualizzare i dati è tramite la funzione plot()

plot(svm_model, training)

SVM classification plot



Aumentando il grado di complessità C=100 possiamo notare di come otterremo meno vettori di supporto, ma tale parametro non dev'essere settato a valori troppo alti, in quanto si potrebbe ricadere in *overfitting*:



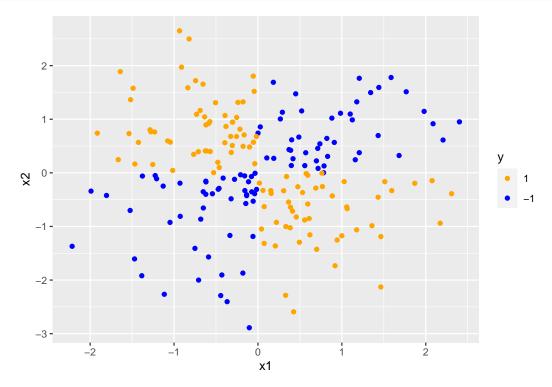
1.2 Il package e1071 - caso non lineare

In questa sezione vedremo come utilizzare il metodo svm() della libreria e1071 nel caso in cui non abbiamo separabilità lineare.

Generiamo 200 punti da una normale con media nulla e varianza unitaria e utilizziamo la funzione xor logico, ovvero per ogni coppia di punti generata in maniera aleatoria calcolo il risultato in questo modo:

$$y = \begin{cases} +1, & \text{se } (x_1 > 0) \oplus (x_2 > 0) \\ -1, & altrimenti \end{cases}$$

In seguito visualizziamo i dati attraverso ggplot2.



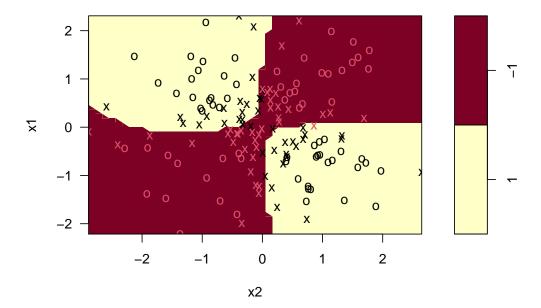
Osserviamo di come non sia possibile dividere le istanze del dataset in maniera lineare, in quanto le non abbiamo separabilità lineare. Procediamo con il partizionare il nostro dataset in training e test sempre con la stessa percentuale (75%/25%) e ad applicare un modello lineare con C=100:

```
1 -1
1 26 23
-1 0 0
```

Come possiamo evincere, l'accuratezza non è molto alta nel test set(circa il 53% (26/49)): notiamo la presenza di 23 istanze che non sono state classificate correttamente.

Procediamo ad utilizzare un kernel *radiale* su questo dataset per verificare di come l'accuratezza predittiva abbia un valore maggiore rispetto al caso precedente.

SVM classification plot



Andiamo a calcolare l'accuratezza predittiva e la matrice di confusione:

```
pred = predict(svm_model, testing)
table(predicted = pred, true = testing$y)
```

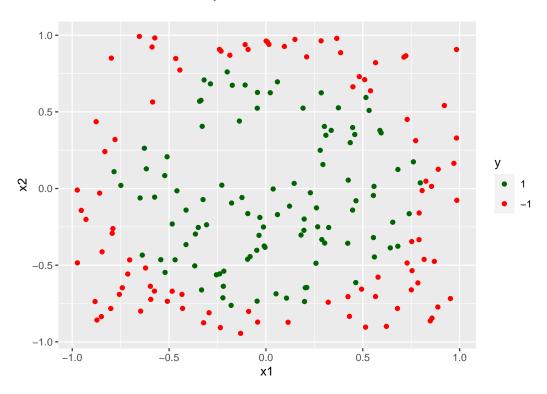
```
true
predicted 1 -1
1 26 2
-1 0 21
```

Possiamo notare di come l'accuratezza predittiva sul test set sia notevolmente maggiore rispetto al caso precedente(lineare). In questo caso è circa il'96%: $[(26 + 21)/49] \cdot 100$.

$1.3~\mathrm{Il}$ package e1071 - dati distribuiti in maniera circolare

Considero un dataset creato allo stesso modo in maniera artificiosa, in cui i dati sono disposti in maniera circolare. La variabile di output sarà definita come segue:

$$y = \begin{cases} +1, & \text{se } \mathbf{x}_1^2 + x_2^2 < raggio^2 \\ -1, & altrimenti \end{cases}$$



Procediamo a questo punto ad applicare 3 differenti tipologie di kernels:

- 1. Kernel polinomiale
- 2. Kernel sigmoidale
- 3. Kernel radiale

e ne valutiamo l'accuratezza predittiva.

Prima di tutto, come al solito, occorre partizionare in training e test set(75%/25%).

Ora possiamo andare ad applicare i tre modelli su dati di training, scegliendo il grado 2 per il polinomio e i valori di default dei parametri cost, gamma, coef0:

Nota:

I valori di default sono: cost = 1, gamma = 0.5, coef0 = 0

Adesso possiamo passare a valutare l'accuratezza predittiva su dati di training e di testing. Visualizziamo inoltre anche la matrice di confusione.

```
Predizione con il modello basato su kernel polinomiale
test_results <- predict(svm_polynomial, newdata = training)</pre>
confusionMatrix(test_results, training$y)
Confusion Matrix and Statistics
         Reference
Prediction 1 -1
       1 75 5
        -1 3 67
               Accuracy : 0.9467
                 95% CI: (0.8976, 0.9767)
   No Information Rate: 0.52
   P-Value [Acc > NIR] : <2e-16
                  Kappa : 0.893
Mcnemar's Test P-Value: 0.7237
            Sensitivity: 0.9615
            Specificity: 0.9306
         Pos Pred Value: 0.9375
         Neg Pred Value: 0.9571
             Prevalence: 0.5200
         Detection Rate: 0.5000
  Detection Prevalence: 0.5333
     Balanced Accuracy: 0.9460
       'Positive' Class : 1
test_results <- predict(svm_polynomial, newdata = testing)</pre>
confusionMatrix(test_results, testing$y)
Confusion Matrix and Statistics
          Reference
```

```
Reference
Prediction 1 -1
1 23 3
-1 3 21
```

Accuracy: 0.88

95% CI : (0.7569, 0.9547)

No Information Rate : 0.52 P-Value [Acc > NIR] : 7.217e-08

Kappa: 0.7596

Mcnemar's Test P-Value : 1

Sensitivity: 0.8846

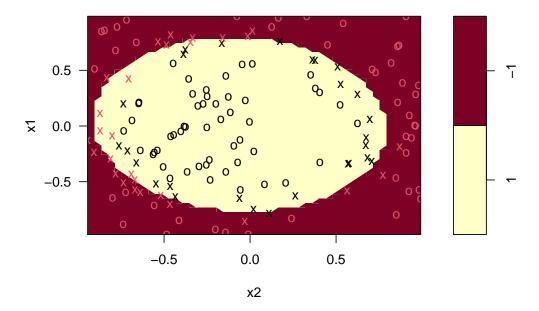
Specificity : 0.8750
Pos Pred Value : 0.8846
Neg Pred Value : 0.8750
Prevalence : 0.5200
Detection Rate : 0.4600
Detection Prevalence : 0.5200
Balanced Accuracy : 0.8798

'Positive' Class : 1

Possiamo visualizzare di come abbiamo ottenuto un accuratezza di circa 95% su dati di train, mentre di 88% su dati di test. Abbiamo solo 6 errori di classificazione errata nel test. Il valore dell'accuratezza è abbastanza buono, usando un polinomio di grado 2. Visualizziamo graficamente i risultati:

plot(svm_polynomial, training)

SVM classification plot



Vediamo ora quali sono i parametri migliori che possono essere usati in questo caso, nel caso in cui si voglia usare un kernel polinomiale

```
[1] 1
```

tune_out\$best.parameters\$gamma

[1] 1

tune_out\$best.parameters\$coef0

[1] 1

tune_out\$best.parameters\$degree

Γ1 2

I parametri migliori sono cost = 1, gamma = 1, coef0 = 1, degree = 2.

Predizione con il modello basato su kernel sigmoidale

Passiamo ad effettuare la predizione su dati di training e su dati di test per quanto riguarda una svm basata su kernel sigmoidale

```
test_results <- predict(svm_sigmoidal, newdata = training)
confusionMatrix(test_results, training$y)</pre>
```

Confusion Matrix and Statistics

```
Reference
```

Prediction 1 -1 1 59 49 -1 19 23

Accuracy: 0.5467

95% CI : (0.4634, 0.628)

No Information Rate : 0.52 P-Value [Acc > NIR] : 0.2839823

Kappa : 0.0771

Mcnemar's Test P-Value: 0.0004368

Sensitivity: 0.7564
Specificity: 0.3194
Pos Pred Value: 0.5463
Neg Pred Value: 0.5476
Prevalence: 0.5200
Detection Rate: 0.3933
Detection Prevalence: 0.7200

Balanced Accuracy: 0.5379

'Positive' Class : 1

Accuratezza su dati di testing:

```
test_results <- predict(svm_sigmoidal, newdata = testing)
confusionMatrix(test_results, testing$y)</pre>
```

Confusion Matrix and Statistics

Reference

Prediction 1 -1 1 18 17 -1 8 7

Accuracy: 0.5

95% CI: (0.3553, 0.6447)

No Information Rate : 0.52 P-Value [Acc > NIR] : 0.6648

Kappa: -0.0163

Mcnemar's Test P-Value : 0.1096

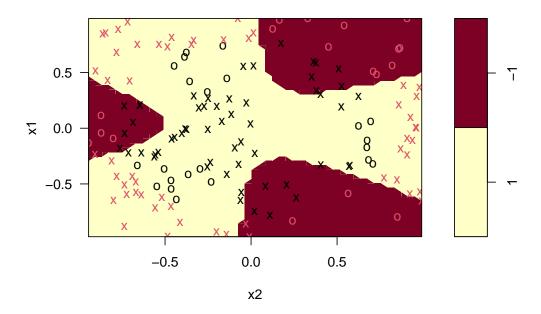
Sensitivity : 0.6923
Specificity : 0.2917
Pos Pred Value : 0.5143
Neg Pred Value : 0.4667
Prevalence : 0.5200
Detection Rate : 0.3600
Detection Prevalence : 0.7000
Balanced Accuracy : 0.4920

'Positive' Class : 1

L'accuratezza è circa 50% sui dati di test, pertanto possiamo concludere che il kernel sigmoidale non ci permette di separare al meglio il nostro dataset. Visualizziamo il risultato:

plot(svm_sigmoidal, training)

SVM classification plot



Predizione con il modello basato su kernel di base radiale

Passiamo ad effettuare la predizione su dati di training e su dati di test per quanto riguarda il vsm basato su kernel radiale

```
train_results <- predict(svm_radial, newdata = training)
confusionMatrix(train_results, training$y)</pre>
```

Confusion Matrix and Statistics

Reference

Prediction 1 -1 1 72 2 -1 6 70

Accuracy : 0.9467

95% CI : (0.8976, 0.9767)

No Information Rate : 0.52 P-Value [Acc > NIR] : <2e-16

Kappa : 0.8934

Mcnemar's Test P-Value : 0.2888

Sensitivity : 0.9231
Specificity : 0.9722
Pos Pred Value : 0.9730
Neg Pred Value : 0.9211
Prevalence : 0.5200
Detection Rate : 0.4800
Detection Prevalence : 0.4933
Balanced Accuracy : 0.9476

'Positive' Class : 1

test_results <- predict(svm_radial, newdata = testing)
confusionMatrix(test_results, testing\$y)</pre>

Confusion Matrix and Statistics

Reference

Prediction 1 -1 1 25 2 -1 1 22

Accuracy: 0.94

95% CI: (0.8345, 0.9875)

No Information Rate : 0.52 P-Value [Acc > NIR] : 1.042e-10

Kappa: 0.8796

Mcnemar's Test P-Value : 1

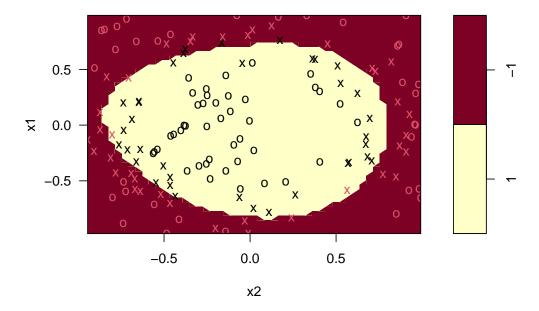
Sensitivity: 0.9615 Specificity: 0.9167 Pos Pred Value : 0.9259
Neg Pred Value : 0.9565
Prevalence : 0.5200
Detection Rate : 0.5000
Detection Prevalence : 0.5400
Balanced Accuracy : 0.9391

'Positive' Class : 1

Attraverso un kernel radiale riusciamo ad avere una accuratezza di circa il 95%, il che indica che con il kernel gaussiano riusciamo ad avere una quasi ottima separazione. Passiamo alla visualizzazione:

plot(svm_radial, training)

SVM classification plot



1.4 Il package Kernlab

Un'altra modalità con cui poter lavorare con le *svm* in R è utilizzare il package *Kernlab*, al cui interno troviamo il metodo **ksvm**, il quale supporta la classificazione basata sul parametro di costo C, quella basata sul parametro $\nu \in [0, 1]$, la regressione basata su ϵ e su ν ed infine la classificazione multiclasse.

Utilizziamo il package e lavoriamo sul dataset diabetes indiani Pima :

```
library(kernlab)
#importo il dataset indiani Pima
library(MASS)
data(Pima.te)
str(Pima.te)
```

'data.frame': 332 obs. of 8 variables: \$ npreg: int 6 1 1 3 2 5 0 1 3 9 ...

\$ glu : int 148 85 89 78 197 166 118 103 126 119 ...

```
$ bp : int 72 66 66 50 70 72 84 30 88 80 ...
$ skin : int 35 29 23 32 45 19 47 38 41 35 ...
$ bmi : num 33.6 26.6 28.1 31 30.5 25.8 45.8 43.3 39.3 29 ...
$ ped : num 0.627 0.351 0.167 0.248 0.158 0.587 0.551 0.183 0.704 0.263 ...
$ age : int 50 31 21 26 53 51 31 33 27 29 ...
$ type : Factor w/ 2 levels "No", "Yes": 2 1 1 2 2 2 2 1 1 2 ...
```

Il dataset è costituito da 7 variabili di input e da 1 variabile di output indicante la presenza o meno del diabete.

Procediamo col partizionare in training e test set, utilizzando questa volta una percentuale 80%/20%:

```
set.seed(1)
inTrain <- createDataPartition(y = Pima.te$type, p = .80, list = FALSE)
training_pima <- Pima.te[ inTrain, ]
testing_pima <- Pima.te[ -inTrain, ]</pre>
```

Procediamo con applicare il modello svm con un kernel lineare, lavorando con ksvm:

Setting default kernel parameters

```
predicted <- kernlab::predict(train_ksvm_pima, testing_pima)
confusionMatrix(predicted, testing_pima$type)</pre>
```

Confusion Matrix and Statistics

```
Reference
Prediction No Yes
No 39 10
Yes 5 11
```

Accuracy : 0.7692

95% CI : (0.6481, 0.8647)

No Information Rate : 0.6769 P-Value [Acc > NIR] : 0.06937

Kappa : 0.4374

Mcnemar's Test P-Value : 0.30170

| Sensitivity : 0.8864 | Specificity : 0.5238 | Pos Pred Value : 0.7959 | Neg Pred Value : 0.6875 | Prevalence : 0.6769 | Detection Rate : 0.6000 | Detection Prevalence : 0.7538 | Balanced Accuracy : 0.7051

```
'Positive' Class : No
```

Notiamo la presenza di accuratezza di circa il 77%. Procediamo con applicare il modello svm con un kernel radiale (gaussiano), lavorando sempre con ksvm:

Confusion Matrix and Statistics

```
Reference
Prediction No Yes
      No 34
      Yes 10 12
              Accuracy: 0.7077
                95% CI: (0.5817, 0.814)
   No Information Rate: 0.6769
   P-Value [Acc > NIR] : 0.3505
                 Kappa: 0.3399
Mcnemar's Test P-Value : 1.0000
           Sensitivity: 0.7727
           Specificity: 0.5714
        Pos Pred Value : 0.7907
        Neg Pred Value: 0.5455
            Prevalence: 0.6769
        Detection Rate: 0.5231
  Detection Prevalence: 0.6615
     Balanced Accuracy: 0.6721
       'Positive' Class : No
```

Notiamo la presenza di una accuratezza di circa il 71% con tale kernel gaussiano.

Procediamo ad effettuare la classificazione basata su kernel polinomiale, usando tuttavia un modello che è il ν -classification, che utilizza il valore di $\nu \in [0,1]$ piuttosto che C, il quale può assumere un qualunque valore positivo.

```
set.seed(1)
train_ksvm_pima <- ksvm(data = training_pima,
          type~.,
          scaled = TRUE,
          type = "nu-svc",
          kernel = "vanilladot",
          nu = 0.5,</pre>
```

```
kpar=list()
predicted <- kernlab::predict(train_ksvm_pima, testing_pima)</pre>
confusionMatrix(predicted, testing_pima$type)
Confusion Matrix and Statistics
         Reference
Prediction No Yes
      No 39
      Yes 5 12
              Accuracy : 0.7846
                 95% CI : (0.6651, 0.8769)
   No Information Rate: 0.6769
   P-Value [Acc > NIR] : 0.03894
                  Kappa : 0.4818
Mcnemar's Test P-Value: 0.42268
            Sensitivity: 0.8864
            Specificity: 0.5714
         Pos Pred Value: 0.8125
         Neg Pred Value: 0.7059
             Prevalence: 0.6769
        Detection Rate: 0.6000
  Detection Prevalence: 0.7385
      Balanced Accuracy: 0.7289
       'Positive' Class : No
```

Notiamo di come l'accuratezza predittiva sia di circa il 78%.

1.5 Il package *gensvm*

Questo package ci permette di lavorare al meglio nel caso in cui ci troviamo in situazioni *multiclasse*. Procediamo con l'installazione e l'import del package:

```
install.packages("gensvm")
library(gensvm)
```

Utilizzeremo il dataset iris, già disponibile in R. Possiamo già passare al partizionamento in train/test: in questo caso, poichè la libreria mette già a disposizione un metodo per poterlo fare, utilizzeremo tale approccio.

```
set.seed(1)
x <- iris[, -5]
y <- iris[, 5]
split_iris <- gensvm::gensvm.train.test.split(x, y, train.size = .75)</pre>
```

Procediamo con l'applicazione del modello SVM, utilizzando un kernel lineare, tramite il metodo qensum:

```
set.seed(1)
fit <- gensvm::gensvm(x=split_iris$x.train,</pre>
```

```
y=split_iris$y.train,
               kernel = "linear",
fit
Data:
    n.objects: 112
    n.features: 4
    n.classes: 3
    classes: setosa versicolor virginica
Parameters:
    p: 1
    lambda: 1e-08
    kappa: 0
    epsilon: 1e-06
    weights: unit
    max.iter: 1e+08
    random.seed: 570175512
    kernel: linear
Results:
    time: 0.1739224
    n.iter: 4457
    n.support: 13
Procediamo con la fase predittiva:
pred<- predict(fit, split_iris$x.test)</pre>
gensvm::gensvm.accuracy(split_iris$y.test, pred)
[1] 0.9736842
table(pred, split_iris$y.test)
             setosa versicolor virginica
pred
  setosa
                 13
                              0
                             14
                                        1
  versicolor
                  0
```

Possiamo notare di come la predizione sia molto alta, usando un kernel lineare (97%) sui dati di test.

10

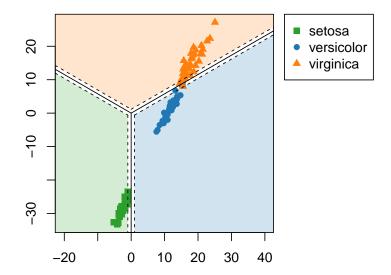
Passiamo alla visualizzazione dei dati tramite il metodo plot():

0

0

virginica

```
plot(fit, split_iris$y.train)
```



1.6 Il package *liquidSVM*

Il package liquidSVM è estremamente rapido in datasets di grandi dimensioni.

```
library(liquidSVM)
```

Proprio perchè si mostra essere molto veloce in dataset grandi, partiamo con l'utilizzo di un dataset contenente 4000 istanze e 3 attributi(2 indipendenti, 1 dipendente, ovvero di output).

```
gi <- liquidData("banana-mc")
```

Confrontiamo liquidSVM con e1071, usando un kernel gaussiano.

```
user system elapsed 117.84 1.16 37.85
```

```
user system elapsed 238.57 0.53 264.69
```

Come possiamo evincere dai risultati precedenti, una 5-fold cross-validation risulta essere molto più rapida con l'utilizzo di liquidSVM, piuttosto che con e1071.

1.7 Ulteriori packages

Vi sono molte altre librerie in R per le support vector machines. Enunciamo le più rilevanti ed utilizzate:

- 1. **gkmsvm**: utilizzata in ambito biomedico, in particolare in biologia, per gestire al meglio il parametro k delle cosiddette k-mer, (cioè le sottosequenze di lunghezza k contenute in una sequenza genomica). Inoltre, la libreria è stata ideata per questo specifico task, ma comunque può essere estesa a qualunque altro problema di classificazione di sequenze;
- 2. *parallelSVM*: utilizzata per ottenere una predizione maggiormente accurata in quanto sfrutta il calcolo in parallelo, indispensabile nel caso in cui ci troviamo a lavorare con *big data*;
- 3. **sparseSVM**: utilizzata anche questa in ambito *big data* ed in particolare quando sono presenti matrici di dati sparse;
- 4. svmplus: implementazione più efficiente delle svm per problemi di classificazione
- 5. WeightSVM: di recente creazione, migliora l'efficienza, poichè sfrutta l'approccio di assegnare pesi diversi a istanze diverse