Uebung 4: Shrinkage

Computational Statistics
Sommersemester 2019
April 15, 2019
J. Groos (FBMN, h_da)

Name:

Aufgabe 1

a)

```
packageTest("ElemStatLearn")

linreg <- lm(lpsa~.-train, data = prostate)
linreg_coeff <- linreg$coefficients
```

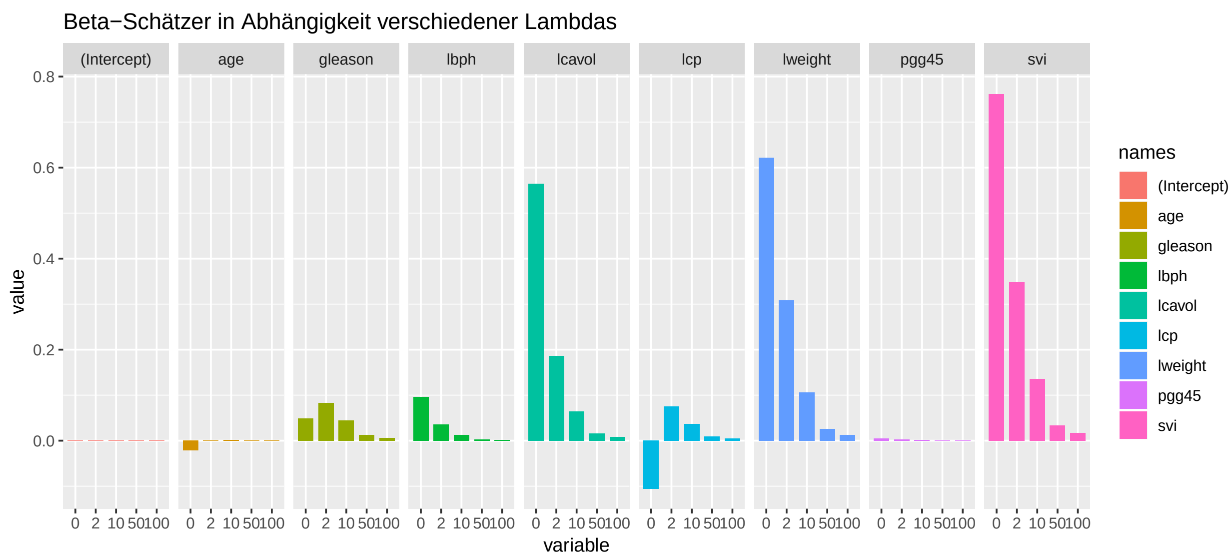
b)

```
packageTest("glmnet")

ridgereg_0 <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 0, lambda = 0)
ridgereg_0_coeff = as.data.frame(as.matrix(ridgereg_0$beta))

ridgereg_10 <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 0, lambda = 10)
ridgereg_10_coeff = as.data.frame(as.matrix(ridgereg_10$beta))

ridgereg_coeffs <- data.frame(ridgereg_0_coeff, ridgereg_10_coeff, linreg_coeff)
colnames(ridgereg_coeffs) <-  c("lambda_0", "lambda_10", "linreg")
ridgereg_coeffs
#>                 lambda_0   lambda_10       linreg
#> (Intercept)  0.000000000 0.000000000  0.181560862
#> lcavol       0.564271417 0.064394837  0.564341279
#> lweight      0.622218451 0.106582457  0.622019787
#> age         -0.021251155 0.001718267 -0.021248185
#> lbph         0.096678106 0.012817952  0.096712523
#> svi          0.761615376 0.135335780  0.761673403
#> lcp         -0.106066349 0.036490103 -0.106050939
#> gleason      0.049475128 0.044694072  0.049227933
#> pgg45        0.004454923 0.001324128  0.004457512

lambda_0_mean <- mean(ridgereg_coeffs$lambda_0)
lambda_10_mean <- mean(ridgereg_coeffs$lambda_10)
```

Man sieht deutlich, dass ein größeres λ die Koeffizienten stärker "schrumpft" als ein kleines λ (Mittelwert der Koeffizienten für $\lambda = 0$: 0.219044; für $\lambda = 10$: 0.0448175). Bei $\lambda = 0$ sind die Koeffizienten (bis auf den Intercept) nahezu identisch mit den geschätzten Koeffizienten des linearen Regressionsmodells. Im Falle $\lambda = 10$ sind zudem alle Koeffizienten positiv.

c)

```r
packageTest("ggplot2")
packageTest("reshape")
packageTest("gridExtra")
packageTest("grid")

coeff_plot <- function(lambda_list, y, linear_model, alpha){
  coeff_list <- matrix(NA, nrow = length(names(linear_model$coefficients)),
                       ncol = length(lambda_list))

  for (i in 1:length(lambda_list)){
    ridgereg <- glmnet(x = model.matrix(linear_model), y = y,
                       alpha = alpha, lambda = lambda_list[i])
    coeff <- as.vector(ridgereg$beta)
    coeff_list[,i] <- coeff
  }
  coeff_list <- as.data.frame(coeff_list)
  colnames(coeff_list) <- lambda_list
  coeff_list$names <- names(linear_model$coefficients)
  return(coeff_list)
}

coeffs <- coeff_plot(lambda_list = c(0, 2, 10, 50, 100), y = prostate$lpsa,
                     linear_model = linreg, alpha = 0)

df1.m <- melt(coeffs,id.vars = "names")

p <-   ggplot(df1.m, aes(x=variable, y=value, fill=names)) +
  geom_bar(stat="identity", width = 0.75) +
    facet_grid(. ~ names) + ggtitle("Beta-Schätzer in Abhängigkeit verschiedener Lambdas")

p
```



Negative β werden mit größer werdendem λ positiv. Außerdem konvergieren die β-Schätzer Richtung 0, werden aber nie genau 0 (anders als beim Lasso-Verfahren).

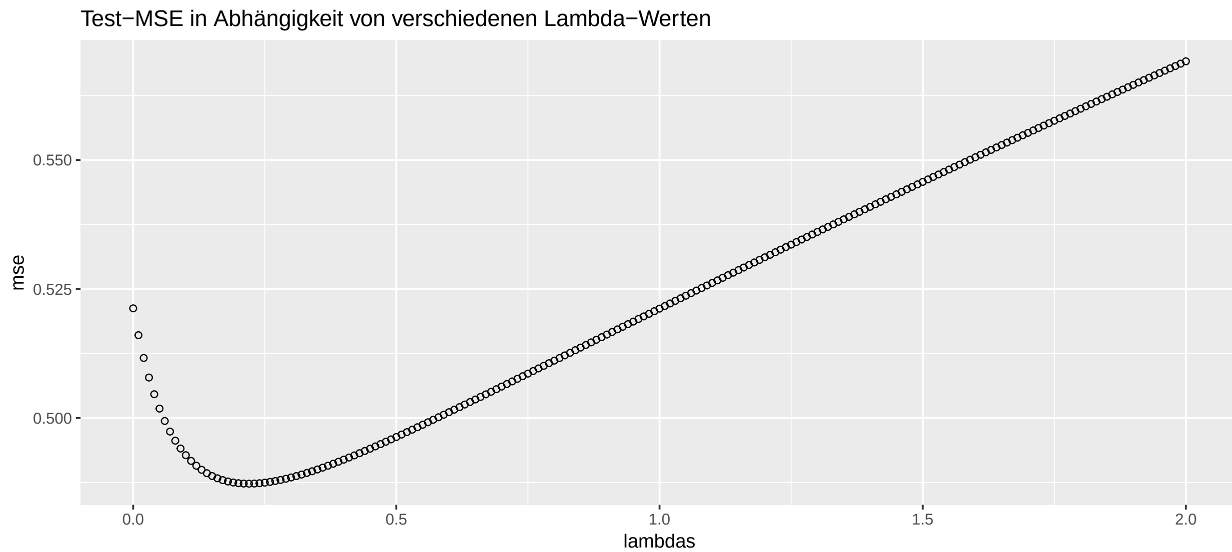
d)

```
train = prostate[prostate$train == TRUE, ]
test = prostate[prostate$train == FALSE, ]

lambdas <- c(0, 0.09, 2)
for (lambda in lambdas){
    ridgereg <- glmnet(x = as.matrix(within(train, rm(lpsa))), y = train$lpsa, alpha = 0,
                       lambda = lambda)
    y.true <- test$lpsa
    y.pred <- predict.glmnet(ridgereg, newx = as.matrix(within(test, rm(lpsa))),
                             lambda = lambda, alpha = 0)
    cat('\n')
    print(lambda)
    cat(mean((y.true-y.pred)^2))
    cat('\n')
}
#>
#> [1] 0
#> 0.52125
#>
#> [1] 0.09
#> 0.4940847
#>
#> [1] 2
#> 0.5691183
```

Das optimale λ liegt im Bereich um 0.09.

e)

```
lambdas <- seq(0, 2, 0.01)
cv_glm_fit <- cv.glmnet(x = as.matrix(within(prostate, rm(lpsa))), y = prostate$lpsa,
                        alpha = 0, lambda = lambdas)
opt_lambda <- cv_glm_fit$lambda.min

mse <- c()
for (lambda in lambdas){
    ridgereg <- glmnet(x = as.matrix(within(train, rm(lpsa))), y = train$lpsa, alpha = 0,
                       lambda = lambda)
    y.true <- test$lpsa
    y.pred <- predict.glmnet(ridgereg, newx = as.matrix(within(test, rm(lpsa))),
                                        lambda = lambda, alpha = 0)
    mse <- append(mse, mean((y.true-y.pred)^2))
}

lambda_mse <- NULL
lambda_mse$lambdas <- lambdas
lambda_mse$mse <- mse

lambda_mse <- as.data.frame(lambda_mse)
ggplot(lambda_mse, aes(x=lambdas, y=mse)) +
    geom_point(shape=1) +
  ggtitle("Test-MSE in Abhängigkeit von verschiedenen Lambda-Werten")
```




```r
opt_lambda_test <- lambda_mse$lambdas[lambda_mse$mse == min(lambda_mse$mse)]
```

Der optimale Schätzer für λ des kompletten Datensatzes beträgt laut cv.glmnet 0.03. Dieser liegt nicht weit vom Lambda-Wert aus d) mit dem niedrigsten Test-MSE (0.09). Der Plot des Test-MSE in Abhängigkeit von verschiedenen λ-Werten spricht allerdings für ein optimales Lambdas von 0.22. Diese Diskrepanz lässt sich durch zwei Faktoren erklären:

1. cv.glmnet führt standardmäßig eine 10-fache Kreuzvalidierung durch, um das beste λ zu finden. Das optimale λ laut Test-MSE wird hier nicht über Kreuzvalidierung ermittelt.
2. Wir ermitteln den Test-MSE "out-of-sample", das heißt die Daten, mit denen wir die Ridge-Regression fitten, sind unterschiedlich.

f)

```r
linreg <- lm(lpsa~.-train, data=prostate)

ridgereg <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 0,
                       lambda = opt_lambda)

ridgereg_coeff <- as.vector(ridgereg$beta)
coeff_df <- NULL
coeff_df$ridgereg_coeffs <- ridgereg_coeff
coeff_df$linreg_coeffs <- linreg_coeff
coeff_df <- as.data.frame(coeff_df)

coeff_df
#>             ridgereg_coeffs linreg_coeffs
#> (Intercept)     0.000000000   0.181560862
#> lcavol          0.534880523   0.564341279
#> lweight         0.616560179   0.622019787
#> age            -0.019426545  -0.021248185
#> lbph            0.092285256   0.096712523
#> svi             0.730145219   0.761673403
#> lcp            -0.077614862  -0.106050939
#> gleason         0.056202870   0.049227933
#> pgg45           0.003968929   0.004457512
```

Vergleicht man die Koeffizienten der Ridge-Regression mit den Koeffizienten der linearen Regression as a) wird der "Shrinking"-Effekt der Ridge-Regression deutlich. Nahezu alle Koeffizienten der Ridge-Regression liegen näher an der 0 als die Koeffizienten der linearen Regression (mit Ausnahme des Koeffizienten der Kovariaten "gleason").

Aufgabe 2

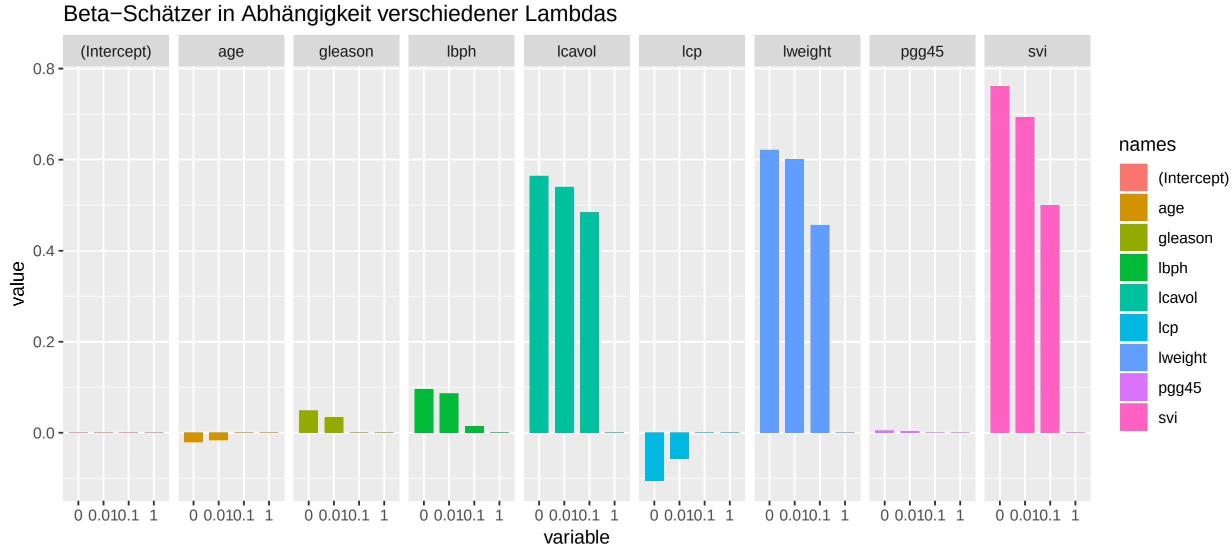
a)

```
packageTest("tidyverse")
lasso_0 <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 1,
                       lambda = 0)
lasso_10 <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 1,
                       lambda = 10)

coeff_df$lasso_0_coeffs <- as.vector(lasso_0$beta)

coeff_df$lasso_10_coeffs <- as.vector(lasso_10$beta)

coeff_df %>% select(2:4)
#>             linreg_coeffs lasso_0_coeffs lasso_10_coeffs
#> (Intercept)   0.181560862    0.000000000               0
#> lcavol        0.564341279    0.564271417               0
#> lweight       0.622019787    0.622218451               0
#> age          -0.021248185   -0.021251155               0
#> lbph          0.096712523    0.096678106               0
#> svi           0.761673403    0.761615376               0
#> lcp          -0.106050939   -0.106066349               0
#> gleason       0.049227933    0.049475128               0
#> pgg45         0.004457512    0.004454923               0
```

Das Lasso-Verfahren mit $\lambda = 0$ generiert nahezu identische β-Schätzer wie die lineare Regression. Bei $\lambda = 10$ liegen alle "geschrumpften" β-Schätzer bereits bei 0.

b)

```
coeffs <- coeff_plot(lambda_list = c(0, 0.01, 0.1, 1), y = prostate$lpsa,
                     linear_model = linreg, alpha = 1)

df1.m <- melt(coeffs,id.vars = "names")

p <-   ggplot(df1.m, aes(x=variable, y=value, fill=names)) +
  geom_bar(stat="identity", width = 0.75) +
    facet_grid(. ~ names) + ggtitle("Beta-Schätzer in Abhängigkeit verschiedener Lambdas")

p
```



Auch beim Lasso-Verfahren zeichnet sich ein ähnliches Bild ab wie bei Aufgabe 1 c). Bei größer werdendem λ "schrumpfen" die β-Schätzer, konvergieren gegen 0 und werden, anders als bei Ridge-Regression, ab einem bestimmten λ sogar 0.

c)

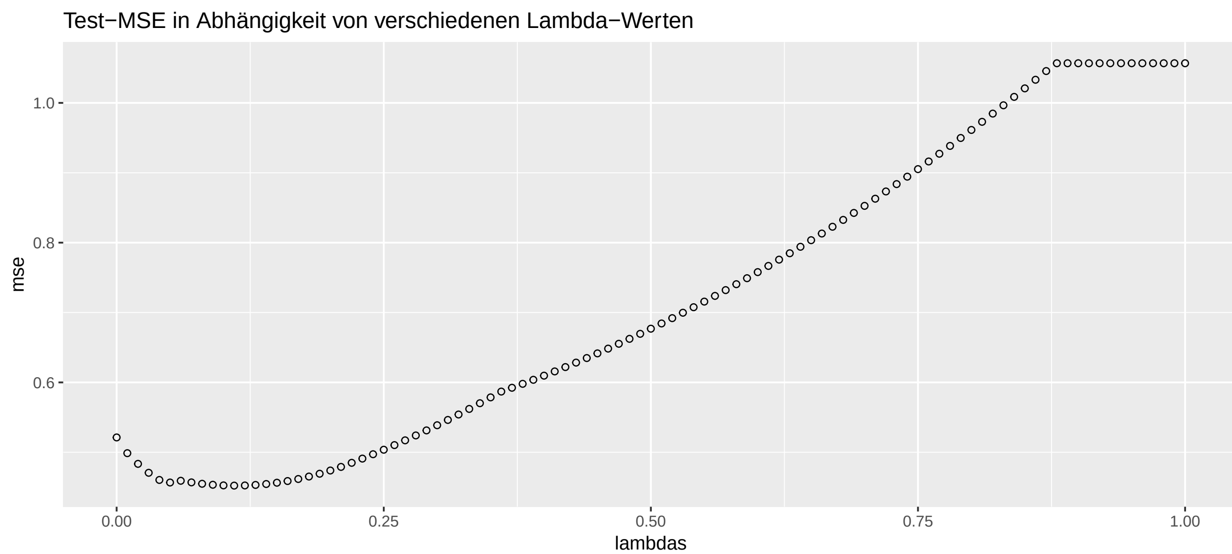
```r
lambdas <- c(0, 0.002, 1)
for (lambda in lambdas){
    ridgereg <- glmnet(x = as.matrix(within(train, rm(lpsa))), y = train$lpsa, alpha = 1,
                       lambda = lambda)
    y.true <- test$lpsa
    y.pred <- predict.glmnet(ridgereg, newx = as.matrix(within(test, rm(lpsa))),
                             lambda = lambda, alpha = 1)
    cat('\n')
    print(lambda)
    cat(mean((y.true-y.pred)^2))
    cat('\n')
}
#>
#> [1] 0
#> 0.52125
#>
#> [1] 0.002
#> 0.5154957
#>
#> [1] 1
#> 1.056733
```

Hier scheint der "Sweet Spot" für λ um 0.002 zu liegen.

d)

```r
lambdas <- seq(0, 1, 0.01)
cv_glm_fit <- cv.glmnet(x = as.matrix(within(prostate, rm(lpsa))), y = prostate$lpsa,
                        alpha = 1, lambda = lambdas)
opt_lambda <- cv_glm_fit$lambda.min
```

```
mse <- c()
for (lambda in lambdas){
    ridgereg <- glmnet(x = as.matrix(within(train, rm(lpsa))), y = train$lpsa, alpha = 1,
                       lambda = lambda)
    y.true <- test$lpsa
    y.pred <- predict.glmnet(ridgereg, newx = as.matrix(within(test, rm(lpsa))),
                             lambda = lambda, alpha = 1)
    mse <- append(mse, mean((y.true-y.pred)^2))
}

lambda_mse <- NULL
lambda_mse$lambdas <- lambdas
lambda_mse$mse <- mse

lambda_mse <- as.data.frame(lambda_mse)
ggplot(lambda_mse, aes(x=lambdas, y=mse)) +
    geom_point(shape=1) +
    ggtitle("Test-MSE in Abhängigkeit von verschiedenen Lambda-Werten")
```




```
opt_lambda_test <- lambda_mse$lambdas[lambda_mse$mse == min(lambda_mse$mse)]
```

Hier liegt der optimale Wert für λ für den kompletten Datensatz bei 0.04. Dieser Wert liegt wieder sehr nahe am ermittelten Optimum aus c). Plottet man den Test-MSE (out-of-sample) in Abhängigkeit verschiedener λ-Werte, kommt man allerdings auf ein ein optimalen λ-Wert von 0.11. Dies liegt wieder an den gleichen Gründen, wie in Aufgabe 1 e).

e)

```
lasso <- glmnet(x = model.matrix(linreg), y = prostate$lpsa, alpha = 1,
                       lambda = opt_lambda)

lasso_coeff <- as.vector(lasso$beta)
coeff_df$lasso_coeff <- lasso_coeff

coeff_df %>% select(2, 5)
```

```
#>             linreg_coeffs  lasso_coeff
#> (Intercept)   0.181560862  0.000000000
#> lcavol        0.564341279  0.505343016
#> lweight       0.622019787  0.536937808
#> age          -0.021248185 -0.007112532
#> lbph          0.096712523  0.057764453
#> svi           0.761673403  0.584346248
#> lcp          -0.106050939  0.000000000
#> gleason       0.049227933  0.000000000
#> pgg45         0.004457512  0.002185322
```

Wie bereits in Aufgabe 1 ist beim Lasso-Verfahren gut zu erkennen, dass die Koeffizienten im Vergleich zur linearen Regression aus Aufgabe 1 a) "geschrumpft" werden und näher an der 0 liegen. Anders als bei der Ridge-Regression sind beim Lasso-Verfahren zwei β-Schätzer tatsächlich 0 geworden (lcp und gleason).