

```
#####
##第七回「L1正則化法：高次元データ解析」
#####
## 必要なライブラリ: caret glmnet LibLinear
library(caret)
library(Liblinear)
library(glmnet)

set.seed(1) #乱数種初期化

#####
## glmnetによる判別
## バイオデータ
data(dhfr)
dim(dhfr) # 228次元, サンプル数325:高次元小標本データ
names(dhfr)

# 訓練データとテストデータの作成
train.index <- sample(nrow(dhfr), nrow(dhfr)*0.75)
data.train <- dhfr[train.index,]
data.test <- dhfr[-train.index,]
indy = 1

dhfr.glm <- glmnet(as.matrix(data.train[, -indy]), data.train[, indy], family="binomial") #デフォルトでalpha=1. つまりL1正則化.
plot.new()
plot(dhfr.glm) #正則化パスのプロット

lamseq = dhfr.glm$lambda #正則化パラメータの列
dhfr.glm.cv <- cv.glmnet(as.matrix(data.train[, -indy]), data.train[, indy], family="binomial", lam=lamseq) #CVスコアの計算
par(mfrow=c(2, 1))
plot(dhfr.glm.cv) #CVスコアのプロット
plot(log(dhfr.glm.cv$lambda), dhfr.glm.cv$nzzero, xlab="log(Lambda)") #228変数のうち使われているのは約50変数以下:スパース!
par(mfrow=c(1, 1))
(dhfr.glm.cv$nzzero[which(dhfr.glm.cv$lambda == dhfr.glm.cv$lambda.min)]) #CVで選ばれた変数は17個
(class_err_glm_cv <- mean(data.test[, indy] != predict(dhfr.glm.cv, as.matrix(data.test[, -indy]), s=dhfr.glm.cv$lambda.min, type="class")) #誤判別率

# 各lambdaごとの誤判別率およびテストデータでの負の対数尤度を求める.
class_err_glm <- c(1:length(lamseq))
pred_acc_glm <- c(1:length(lamseq))
i <- 0
for(lam in lamseq){
  i <- i+1
  (class_err_glm[i] <- mean(data.test[, indy] != predict(dhfr.glm.cv, as.matrix(data.test[, -indy]), s=lam, type="class")) #誤判別率
  pred_link <- predict(dhfr.glm.cv, as.matrix(data.test[, -indy]), s=lam, type="link") #beta^T xの値.
  pred_prob <- predict(dhfr.glm.cv, as.matrix(data.test[, -indy]), s=lam, type="response") #ラベル=inactiveとなる確率.
  activeyind = which(data.test[, indy]=="active") #テストデータでラベル=activeとなっているインデックス.
  (pred_acc_glm[i] <- (sum(log(1+exp(-pred_link[-activeyind]))) + sum(log(1+exp(pred_link[activeyind]))))/length(data.test[, indy])) #テストデータでの負の対数尤度
}

plot.new()
par(mfrow=c(3, 1))
plot(lamseq, class_err_glm, log="x", ylab="判別誤差")
plot(lamseq, dhfr.glm.cv$cvm, log="x", ylab="CVスコア")
plot(lamseq, pred_acc_glm, log="x", ylab="予測精度")
par(mfrow=c(1, 1)) # CVスコアと判別誤差・予測精度との関係に注目

#####
## Liblinearを用いたL1正則化判別分析
```

```
## スパムメール判別
```

```
spam <- read.csv("./spambase/spambase.data", header=FALSE)
train.index <- sample(nrow(spam), nrow(spam)*0.5)
data.train <- spam[train.index,]
data.test <- spam[-train.index,]
yind <- 58
dimx <- 57
```

```
numlam <- 20
lamseq = 10^(seq(-4, 4, length.out = numlam)) #lambdaの候補
```

```
class_acc <- c(1:numlam)
i <- 0
for(lam in lamseq){
  i <- i+1;
  spam.liblin <- Liblinear(as.matrix(data.train[,1:dimx]), data.train[,yind], type=6, cost=lam, epsilon = 0.001) #costは1/lambdaのようなもの.
  class_acc[i] <- mean(data.test[,yind] == predict(spam.liblin, as.matrix(data.test[, -yind]))$predictions)
}
max(class_acc) #最適な判別精度
plot(log(lamseq), class_acc, type="l", xlab="log(1/lambda)")
```

```
bestlam <- lamseq[which.max(class_acc)] #最適なlambda
spam.bestliblin <- Liblinear(as.matrix(data.train[,1:dimx]), data.train[,yind], type=6, cost=bestlam, epsilon = 0.001) #最適なlambdaでの判別
```

```
which(spam.bestliblin$W==0)
table(data.test[,yind], predict(spam.bestliblin, as.matrix(data.test[, -yind]))$predictions) #よく判別できている.
```

```
#続いてCVスコアと実際の判別誤差の関係をプロットしてみる.
```

```
CV_SCORE <- c(1:numlam)
i <- 0
for(lam in lamseq){
  i <- i+1;
  CV_SCORE[i] <- Liblinear(as.matrix(data.train[,1:dimx]), data.train[,yind], type=6, cost=lam, epsilon = 0.001, cross = 10)
}
```

```
plot(class_acc, type='l', col='red', ylim=c(0.7, 0.95))
lines(CV_SCORE, col='black')
```

```
# デモのスパムメール判別では低次元の問題を扱ったが、興味のある人は、
# 次のリンク先にあるデータで試してみると良いだろう.
# ECML-PKDD 2006 Discovery Challenge
# http://www.ecmlpkdd2006.org/challenge.html
# Download of Data Setsからデータは手に入る.
# libsvmフォーマットでデータが記述されているのでデータの整形が必要.
```