# Vorlesung Wissensentdeckung in Datenbanken

## Klassifikation und Regression

Katharina Morik, Claus Weihs

LS 8 Künstliche Intelligenz Fakultät für Informatik
Computergestützte Statistik
Technische Universität Dortmund

5.5.2015





## Gliederung







## Grundlagen

Sei $X = \{X_1, \ldots, X_p\}$ eine Menge von Zufallsvariablen und $Y \neq \emptyset$ eine Menge.

Ein Beispiel (oder *Beobachtung*) $\vec{x}$ ist ein konkreter $p$-dimensionaler Vektor über diese Zufallsvariablen.

Eine Menge von $n$ Beispielen $\mathbf{X} = \{\vec{x}_1, \ldots, \vec{x}_N\}$ können wir dann als $(N \times p)$-Matrix auffassen:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \ldots & x_{1,p} \\ x_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \ldots & x_{N,p} \end{pmatrix}$$

Dabei entspricht jede Zeile $\vec{x}_i$ der Matrix $\mathbf{X}$ einem Beispiel.





## Klassifikation und Regression

Beim *überwachten Lernen* (darum geht es hier), ist zusätzlich zu jeder Beobachtung $\vec{x}$ ein *Label* (*Klasse*) $y$ gegeben, d.h. wir haben Beobachtungen $(\vec{x}, y) \in X \times Y$.

$Y$ kann sowohl eine qualitative, als auch eine quantitative Beschreibung von $\vec{x}$ sein.

Für den quantitativen Fall ist z.B. $Y = \mathbb{R}$ und wir versuchen für unbekanntes $\vec{x}$ den Wert $y$ vorherzusagen Regression.

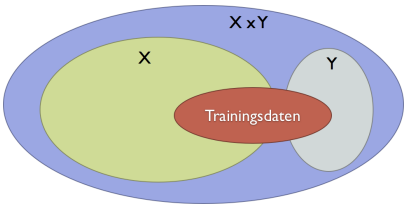
Im Falle qualitativer Beschreibungen ist $Y$ eine diskrete Menge und wir nutzen $f$ zur Klassifikation.





## Lernen auf Trainingsdaten

Wovon gehen wir also aus? Was ist unser Ziel?




- Wir suchen *die wahre Funktion* $f : X \to Y$ mit

$$f(\vec{x}) = y \quad \forall\, (\vec{x}, y) \in X \times Y$$

- Wir haben jedoch nur eine Teilmenge der Beobachtungen gegeben (Trainingsdaten)





## Klassifikation und Regression

Auf Grundlage der Trainingsdaten suchen wir eine möglichst gute Annäherung $\hat{f}$ an die *wahre Funktion* $f$.

Die Funktion $\hat{f}$ bezeichnen wir auch als das gelernte Modell.

Haben wir ein Modell $\hat{f}$ gelernt, so liefert uns dieses Modell mit

$$\hat{y} = \hat{f}(\vec{x})$$

für *neue Daten* $\vec{x} \in X$ eine Vorhersage $\hat{y} \in Y$.

## Klassifikation und Regression

Im Falle der *Regression* lässt sich so für zuvor unbekannte $\vec{x} \in X$ der Wert

$$\hat{y} = \hat{f}(\vec{x})$$

mit $\hat{y} \in \mathbb{R}$ vorhersagen.

Dieses Modell $\hat{f}$ lässt sich auch für die Klassifikation nutzen, bei der z.B. $\hat{y} \in \{-1, +1\}$ vorhergesagt werden sollen:

$$\hat{y} = \begin{cases} +1, & \text{falls } \hat{f}(\vec{x}) \geq \theta \\ -1, & \text{sonst} \end{cases}$$

Hier ist $\theta$ ein vorgegebener Schwellwert.





## Beispiel

Gegeben seien Gewicht ($X_1$) und Größe ($X_2$) einiger Personen und ein Label $y \in \{m, w\}$:

| | $X_1$ | $X_2$ | $Y$ |
|---|---|---|---|
| $x_1$ | 91 | 190 | m |
| $x_2$ | 60 | 170 | w |
| $x_3$ | 41 | 160 | w |
| $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ |

Die Tabelle enthält die zur Verfügung stehenden Trainingsdaten, also

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 91 & 190 \\ 60 & 170 \\ 41 & 160 \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

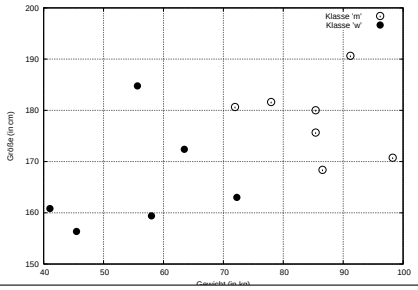




## Beispiel

Es wird nun eine Funktion $\hat{f}$ gesucht, die für neue Daten $\vec{x}$ das Attribut $Y$ (Geschlecht) voraussagt, also

$$\hat{y} = \begin{cases} \text{m, falls } \hat{f}(x) > \theta \\ \text{w, sonst} \end{cases}$$








## Lineare Modelle

Welche Art von Funktionen sind denkbar?

Lineare Funktionen als einfachste Funktionenklasse:

$$y = f(x) = mx + b \quad \text{Gerade im } \mathbb{R}^2$$

Allerdings betrachten wir als Beispielraum den $\mathbb{R}^p$, d.h. wir brauchen eine verallgemeinerte Form:

$$y = f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i + \beta_0 \quad \text{mit } \beta_0 \in \mathbb{R}, \vec{x}, \vec{\beta} \in \mathbb{R}^p \qquad (1)$$

Die Funktion $f$ wird also durch $\vec{\beta}$ und $\beta_0$ festgelegt und sagt uns für ein gegebenes $\vec{x}$ das entsprechende $y$ voraus





## Notation, Vereinbarungen

Bei genauerer Betrachtung von Formel (1) lässt sich $\sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i$ als Matrizenmultiplikation oder Skalarprodukt schreiben, also

$$y = \sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i + \beta_0 = \vec{x}^T \vec{\beta} + \beta_0 = \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle + \beta_0$$

Zur einfacheren Darstellung von $f$, wird $\beta_0$ in den Vektor $\vec{\beta}$ codiert, indem jedes Beispiel $x = (x_1, \ldots, x_p)$ aufgefasst wird als $(p+1)$-dimensionaler Vektor

$$(x_1, \ldots, x_p) \mapsto (1, x_1, \ldots, x_p)$$

Dies ermöglicht die Darstellung von $f$ als:

$$y = f(\vec{x}) = \sum_{i=0}^{p} \beta_i x_i = \vec{x}^T \vec{\beta} = \left\langle \vec{x}, \vec{\beta} \right\rangle$$





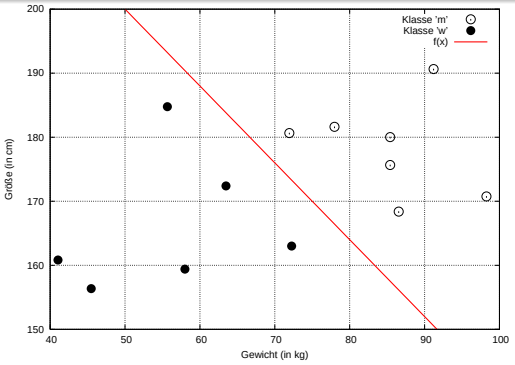
## Was haben wir nun gemacht?

Wir haben (bei der Beschränkung auf lineare Modelle) nun eine Darstellung für das, was wir *lernen* wollen:

$$y = \hat{f}(\vec{x}) = \vec{x}^T \vec{\beta}$$

Wir haben die Zielfunktion $\hat{f}$ in Abhängigkeit von $\vec{\beta}$ geschrieben und müssen *nur noch* das passende $\vec{\beta}$ finden.

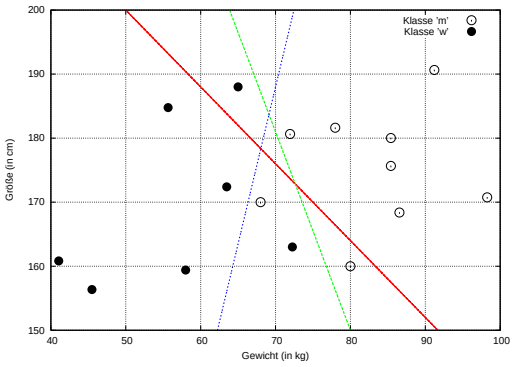
## Beispiel: Ein mögliches $\vec{\beta}$




$$f(\vec{x}) = \vec{x}^T\hat{\vec{\beta}} \quad \text{mit} \quad \hat{\vec{\beta}} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 260 \\ 1 \\ 1.2 \end{pmatrix} \theta = 550$$



## Es ist nicht garantiert, dass $\vec{\beta}$ immer passt!






## Modell-Anpassung

Unsere linearen Modelle sind durch $\vec{\beta}$ parametrisiert, das Lernen eines Modells haben wir also auf die Wahl eines $\vec{\beta}$ abgewälzt.

Das wirft eine Reihe von Fragen auf:

- Was ist ein gutes $\vec{\beta}$?
- Gibt es ein optimales $\vec{\beta}$?
- Welche Möglichkeiten haben wir, unser Modell zu beurteilen?

Eine Möglichkeit: Berechne den *Trainingsfehler*

$$Err(\vec{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} |y_i - \hat{f}(\vec{x}_i)| = \sum_{i=1}^{N} |y_i - x_i^T\vec{\beta}|$$



## Modell-Anpassung

Häufig wird als Fehlerfunktion die *quadratische Fehlersumme* (RSS) verwendet:

$$\begin{aligned} RSS(\vec{\beta}) &= \sum_{i=1}^{N}(y_i - \vec{x_i}^T\vec{\beta})^2 \\ &= (\vec{y} - \mathbf{X}\vec{\beta})^T(\vec{y} - \mathbf{X}\vec{\beta}) \end{aligned}$$

Wir wählen jetzt $\vec{\beta}$ derart, dass der Fehler minimiert wird:

$$\min_{\vec{\beta}\in\mathbb{R}^p} RSS(\vec{\beta}) \qquad (2)$$

$\Rightarrow$ Konvexes Minimierungsproblem!



## Minimierung von RSS($\vec{\beta}$)

Um $RSS(\vec{\beta})$ zu minimieren, bilden wir die partielle Ableitung nach $\vec{\beta}$:

$$\frac{\partial RSS(\vec{\beta})}{\partial \beta} = \mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\vec{\beta})$$

Notwendige Bedingung für die Existenz eines (lokalen) Minimums von $RSS$ ist

$$\frac{\partial RSS(\vec{\beta})}{\partial \beta} = \mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\vec{\beta}) = 0$$

Ist $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ regulär, so erhalten wir

$$\hat{\vec{\beta}} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} \qquad (3)$$



## Reguläre Matrix

Wenn es zu einer quadratischen Matrix $\mathbf{X}$ eine Matrix $\mathbf{X^{-1}}$ gibt mit

$$\mathbf{X}\mathbf{X^{-1}} = \mathbf{X^{-1}}\mathbf{X} = \mathbf{I}$$

Einheitsmatrix

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ . & . & \ldots & 0 \\ . & . & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}$$

dann ist die Matrix $\mathbf{X}$ invertierbar oder *regulär*, sonst *singulär*.

## Optimales $\hat{\vec{\beta}}$?

Mit Hilfe der Minimierung der (quadratischen) Fehlerfunktion $RSS$ auf unseren Trainingsdaten haben wir ein (bzgl. RSS) optimales $\hat{\vec{\beta}}$ gefunden.

Bei einem konvexen Problem ist das lokale auch das globale Minimum.
Damit liefert unser Modell Voraussagen $\hat{y}$ für $\vec{x} \in X$:

$$\hat{y} = \hat{f}(\vec{x}) = x^T \hat{\vec{\beta}}$$





## Sind wir schon fertig?

- Schön wär's!
- Aber drei Gründe sprechen für weitere Arbeit:
  1. Es ist nicht immer so einfach, z.B. dann nicht, wenn wir viele Dimensionen haben (Fluch der hohen Dimension).
  2. Vielleicht lassen sich die Beispiele nicht linear trennen!
  3. Nur den Fehler zu minimieren reicht nicht aus, wir suchen noch nach weiteren Beschränkungen, die zu besseren Lösungen führen.
- Also schauen wir uns den Fehler noch einmal genauer an, stoßen auf Bias und Varianz und merken, dass wir noch keine perfekte Lösung haben.





## Fehler

- Bisher haben wir mit RSS die Fehler einfach summiert.
- Wir wollen aber einbeziehen, wie wahrscheinlich der Fehler ist – vielleicht ist er ja ganz unwahrscheinlich! Das machen wir über den Erwartungswert.
- Wir können sehr unterschiedliche Stichproben als Beispielmenge haben. Der Fehler soll sich auf alle möglichen Trainingsmengen beziehen – nicht nur eine, zufällig günstige!





## Zur Erinnerung: Erwartungswert

### Erwartungswert

Sei $X$ eine diskrete Zufallsvariable, mit Werten $x_1, \ldots, x_n$ und $p_i$ die Wahrscheinlichkeit für $x_i$. Der Erwartungswert von $X$ ist

$$E(X) = \sum_i x_i p_i = \sum_i x_i P(X = x_i)$$

Ist $X$ eine stetige Zufallsvariable und $f$ die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, so ist der Erwartungswert von $X$

$$E(X) = \int_{-\infty}^{\infty} x\, f(x) dx$$





## Erwartungswert (Eigenschaften)

### Eigenschaften

Seien $X, Y$ und $X_1, \ldots, X_n$ Zufallsvariablen, dann gilt:

- Der Erwartungswert ist additiv, d.h. es gilt

$$E\left(\sum_{i=1}^{n} X_i\right) = \sum_{i=1}^{n} E(X_i) \tag{4}$$

- Ist $Y = kX + d$, so gilt für den Erwartungswert

$$E(Y) = E(kX + d) = kE(X) + d \tag{5}$$

- Sind die Zufallsvariablen $X_i$ stochastisch unabhängig, gilt

$$E\left(\prod_{i=1}^{n} X_i\right) = \prod_{i=1}^{n} E(X_i)$$





## Varianz und Standardabweichung

Über den Erwartungswert einer Zufallsvariablen $X$ sind mehrere Eigenschaften von $X$ definiert, die helfen, $X$ zu charakterisieren:

### Varianz

Sei $X$ eine Zufallsvariable mit $\mu = E(X)$. Die Varianz $Var(X)$ ist definiert als

$$Var(X) := E\left((X - \mu)^2\right).$$

Die Varianz wird häufig auch mit $\sigma^2$ bezeichnet.

### Standardabweichung

Die Standardabweichung $\sigma$ einer Zufallsvariable $X$ ist definiert als

$$\sigma := \sqrt{Var(X)}$$

## Varianz und Standardabweichung

**Verschiebungssatz**

Sei $X$ eine Zufallsvariable, für die Varianz gilt

$$Var(X) = E(X - E(X))^2 = E(X^2) - (E(X))^2$$





## Bias

Eine weitere Charakteristik, die häufig zur Beschreibung von erwarteten Fehlern verwendet wird, ist die Verzerrung:

**Verzerrung (Bias)**

Sei $Y$ eine Zufallsvariable, dann ist die Verzerrung definiert als der erwartete Schätzfehler für $Y$
also wie im Durchschnitt die Schätzungen vom wahren Mittelwert abweichen

$$Bias(\hat{y}) = E(Y - \hat{y}) = E(Y) - \hat{y}$$





## Fehler der Regression

- Fehlerfunktion $L(y, \hat{y})$ für gelernte Modelle $\hat{f}$
  - absolut $\sum(y_i - \hat{y}_i)$
  - quadratisch $\sum(y_i - \hat{y}_i)^2$
  - 0,1-Fehler $\sum \delta_i$, $\delta = 1$, falls $y = \hat{y}$, sonst 0.
- Es geht um $Y$. Wir unterscheiden
  - das wahre $y$,
  - das in der Beispielmenge genannte $y$,
  - das vom Modell vorhergesagte $\hat{y}$
- Wir wollen den Erwartungswert des Fehlers minimieren.
- Wir mitteln über alle möglichen Beispielmengen $\mathcal{T}$.





## Erwartungswert des Fehlers einer Regression minimieren!

Erwarteter quadratischer Vorhersagefehler: Gelernte Funktion $\hat{f} : X \to Y$, der Erwartungswert ihres Fehlers ist:

$$EPE(f) = E(Y - \hat{f}(X))^2 \quad (6)$$

Optimierungsproblem: Wähle $\hat{f}$ so, dass der erwartete Fehler minimiert wird!

$$\hat{f}(x) = argmin_c E_{Y|X}((Y - c)^2 | X = x) \quad (7)$$

Lösung (Regressionsfunktion): $\hat{f}(x) = E(Y|X = x)$





## Bias und Varianz

Zwei Aspekte machen den erwarteten Fehler aus, die Verzerrung (Bias) und die Varianz. Wir wollen den Fehler an einem Testpunkt $x_0 = 0$ angeben und mitteln über allen Trainingsmengen $\mathcal{T}$.

- Wir gehen davon aus, dass die Angaben in den Daten nicht immer ganz stimmen, so dass es einen Messfehler $\epsilon$ gibt, dessen Erwartungswert aber 0 ist.
- Der Bias ist unabhängig vom Beispielsatz und 0 bei einem perfekten Lerner.
- Die Varianz ist unabhängig vom wahren Wert $y$ und 0 bei einem Lerner, der bei allen Beispielsätzen dasselbe ausgibt.





## MSE Dekomposition in Bias und Varianz

Wir nehmen für unser Modell an,
dass $Y = f(x) + \epsilon$ und $E(\epsilon) = 0$.

$$\begin{aligned} EPE(x_0) = & \quad E_{Y,\mathcal{T}}((Y - \hat{y_0})^2 | x_0) & \\ = & \quad E_Y((Y - f(x_0))^2 | x_0) + & \sigma^2 Rauschen \\ & E_{\mathcal{T}}((f(x_0) - E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}))^2 | x_0) + & Bias^2 \\ & E_{\mathcal{T}}((E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}) - \hat{y_0})^2 | x_0) & Varianz \end{aligned}$$

Wie das?!

Haupttrick: kreatives Einfügen von Termen, $+a - a$, die nichts ändern, aber Umformungen erlauben.

## Herleitung der Dekomposition - 1

$$
\begin{aligned}
EPE(x_0) = & \quad E_{Y,\mathcal{T}}((Y-\hat{y}_0)^2|x_0) & \\
= & \quad E_{Y,\mathcal{T}}(((Y-f(x_0))+(f(x_0)-\hat{y}_0))^2|x_0) & kreativ \\
= & \quad E_{Y,\mathcal{T}}((Y-f(x_0))^2+(f(x_0)-\hat{y}_0)^2+ & binomisch \\
& \quad 2(Y-f(x_0))(f(x_0)-\hat{y}_0)|x_0) & \\
= & \quad E_Y((Y-f(x_0))^2|x_0)+ & herausziehen \\
& \quad E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-\hat{y}_0)^2|x_0)+ & s.Formel(4) \\
& \quad 2E_Y(Y-f(x_0)|x_0)E_{Y,\mathcal{T}}(f(x_0)-\hat{y}_0|x_0) & E(2)=2
\end{aligned}
$$

Jetzt $E_Y(Y-f(x_0)|x_0) = E_Y(Y|x_0) - f(x_0) = 0$ wegen der Modellannahme $E_Y(Y|x_0) = f(x_0)$.





## Herleitung der Dekomposition - 2

$$
\begin{aligned}
EPE(x_0) = & \quad E_Y((Y-f(x_0))^2|x_0)+ & Var_\epsilon \\
& \quad E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-\hat{y}_0)^2|x_0) & \\
= & \quad Var_\epsilon + E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-\hat{y}_0)^2|x_0) & \\
= & \quad Var_\epsilon + E_{Y,\mathcal{T}}(((f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0))+ & kreativ \\
& \quad (E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0))^2|x_0) & \\
= & \quad Var_\epsilon + E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0))^2+ & binomisch \\
& \quad (E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0)^2+ & \\
& \quad 2(f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0))(E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0|x_0)) & \\
= & \quad Var_\epsilon + E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0))^2|x_0)+ & herausziehen \\
& \quad E_{Y,\mathcal{T}}((E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0)^2|x_0)+ & (4) \\
& \quad 2E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)) & \\
& \quad (E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0)|x_0) &
\end{aligned}
$$





## Herleitung der Dekomposition - 3

Rauschen haben wir schon gefunden. Bias und Varianz auch!

$$
\begin{aligned}
EPE(x_0) = & \quad Var_\epsilon + & \sigma^2 Rauschen \\
& \quad E_{Y,\mathcal{T}}((f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0))^2|x_0)+ & Bias^2 \\
& \quad E_{Y,\mathcal{T}}((E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)-\hat{y}_0)^2|x_0)+ & Varianz \\
& \quad 2E_{Y,\mathcal{T}}(f(x_0)-E_{Y,\mathcal{T}}(\hat{y}_0)) & Konstanten \\
& \quad (E_{Y,\mathcal{T}}(E_{Y,\mathcal{T}}\hat{y}_0-\hat{y}_0|x_0)) & =0 \\
= & \quad E_{Y,\mathcal{T}}((Y-\hat{y}_0)^2|x_0) & q.e.d.
\end{aligned}
$$

Wir betrachten den Fehler also als zusammengesetzt aus Rauschen, Verzerrung und Varianz. Die Dekomposition des MSE in Bias und Varianz abstrahiert so, dass wir besser über Modelle nachdenken können.





## Bias und Varianz bei linearen Modellen

Das lineare Modell wird an die Daten angepasst durch

$$\hat{f}_p(\vec{x}) = \hat{\beta}^T\vec{x}$$

Der Fehler ist dann für ein beliebiges $\vec{x}$:

$$
\begin{aligned}
Err(\vec{x_0}) &= E[(Y-\hat{f}_p(\vec{x_0}))^2|X=\vec{x_0}] && (8)\\
&= \sigma_\epsilon^2 + Var(\hat{f}_p(\vec{x_0})) + \left[f(\vec{x_0}) - E\hat{f}_p(\vec{x_0})\right]^2 && (9)
\end{aligned}
$$

Die Anpassung des linearen Modells geht über alle $N$ Beispiele und gewichtet alle $p$ Merkmale (s. (3)).
Diese Varianz ist von $x_i$ zu $x_i$ verschieden. Im Mittel über allen $\vec{x_i}$ ist $Var(\hat{f}_p) = (p/N)\sigma_\epsilon^2$.





## Zusammenhang zwischen Anzahl der Beispiele, der Attribute und erwartetem Fehler

Modellkomplexität $(p, N)$ und Varianz der Schätzungen bei unterschiedlichen Trainingsmengen hängen bei linearen Modellen direkt zusammen.
Gemittelt über alle $x_i$ ist der Trainingsfehler linearer Modelle:

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} Err(x_i) = \sigma_\epsilon^2 + \frac{p}{N}\sigma_\epsilon^2 + \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[f(\vec{x_i}) - E\hat{f}(\vec{x_i})\right]^2 \quad (10)$$

Wir haben also wieder das Rauschen, die Varianz, die die Schwankungen der Schätzungen angibt, und den Bias, der sich auf die Differenz von Schätzung und Wahrheit bezieht (in-sample error).





## Fluch der hohen Dimension bei linearen Modellen

- Leider mussten wir annehmen, dass das Modell genau passt, um den erwarteten Fehler klein zu halten.
- Wir wissen aber nicht, welche Art von Funktion gut zu unseren Daten passt! Modellselektion ist schwierig!
- Das Modell muss immer komplizierter werden, je mehr Dimensionen es gibt.
- Bei linearen Modellen entspricht die Komplexität des Modells direkt $p$, denn $\beta$ hat so viele Komponenten wie $p$ bzw. $p+1$.

## Lineare Modelle

Die grünen und roten Datenpunkte werden durch eine Ebene getrennt.


Figure 2.1: *A classification example in two dimensions. The classes are coded as a binary variable—*GREEN $= 0$, RED $= 1$*—and then fit by linear regression. The line is the decision boundary defined by* $x^T\hat{\beta} = 0.5$.





## Was wissen Sie jetzt?

- Sie haben theoretisch lineare Modelle für Klassifikation und Regression kennengelernt.
- Sie kennen das Optimierungsproblem der kleinsten Quadrate RSS (Gleichung 2) für lineare Modelle (Gleichung 3).
- Sie kennen den erwarteten Fehler EPE bei linearen Modellen (Gleichung 6).
- Sie kennen den Fluch der hohen Dimension bei linearen Modellen: Komplexität und Varianz hängen an der Dimension! Der Bias kann sehr hoch sein, wenn die Beispiele tatsächlich nicht linear separierbar sind.





## Bis zum nächsten Mal...

- Gehen Sie alle Folien noch einmal in Ruhe durch.
- Rechnen Sie mal ein Beispiel durch mit Gleichung zur Optimierung linearer Modelle (3), der Minimierung des Trainingsfehlers (10)...
- Diskutieren Sie, warum Bias und Varianz so wichtig sind!
- Probieren Sie lineare Regression in RapidMiner aus!





## Globale und lokale Modelle

- Lineare Modelle finden eine trennende Hyperebene.
- Die durch $\vec{\beta}$ angegebene Hyperebene wurde durch alle Beispiele bestimmt.
- Deshalb sind lineare Modelle globale Modelle.
- Klassifiziert man ein Beispiel nur anhand der Beispiele seiner Umgebung, spricht man von einem lokalen Modell.
- Nächste Nachbarn sind ein lokales Modell.





## Nächste Nachbarn

- Das $k$NN-Modell betrachtet nur noch die $k$ nächsten Nachbarn eines Beispiel $\vec{x}$:

$$\hat{f}(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})} y_i \qquad (11)$$

- Die Nachbarschaft $N_k(\vec{x})$ wird durch ein Abstandsmaß, z.B. den Euklidschen Abstand bestimmt.
- Es gibt maximal $\frac{N}{k}$ Nachbarschaften und in jeder bestimmen wir den Durchschnitt (11).





## Regression und Klassifikation

Gleichung (11) gibt als Regressionsfunktion den Mittelwert der $y_i$ zurück.

$$\hat{f}(\vec{x}) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})} y_i$$

Wir können durch einen Schwellwert aus der Regression eine Klassifikation machen:

$$\hat{y} = \begin{cases} 1, & falls\ \hat{f}(\vec{x}) \geq 0,5 \\ 0, & sonst \end{cases}$$

## Die grünen und roten Datenpunkte werden in Nachbarschaften gruppiert

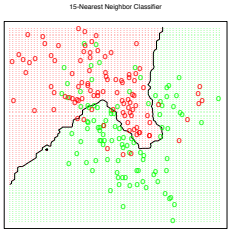



Figure 2.2: *The same classification example in two dimensions as in Figure 2.1. The classes are coded as a binary variable* (GREEN $= 0$, RED $= 1$) *and then fit by* 15*-nearest-neighbor averaging as in (2.8). The predicted class is hence chosen by majority vote amongst the* 15*-nearest neighbors.*





## Bei k=1 wird nur auswendig gelernt.

- Falls $\vec{x} = \vec{x}' \rightarrow y = y'$, gibt es bei $k = 1$ keinen Trainingsfehler.
- Wenn allein der Trainingsfehler das Optimierungskriterium ist, würden wir stets $k = 1$ nehmen und nur auswendig lernen.
- Vermutlich ergibt das auf den Testdaten einen großen Fehler!





## Overfitting

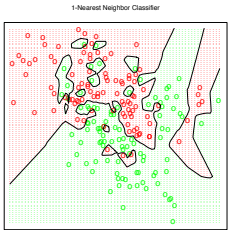



Figure 2.3: *The same classification example in two dimensions as in Figure 2.1. The classes are coded as a binary variable* (GREEN $= 0$, RED $= 1$)*, and then predicted by* 1*-nearest-neighbor classification.*





## Training- und Testfehler bei verschiedenen $k$

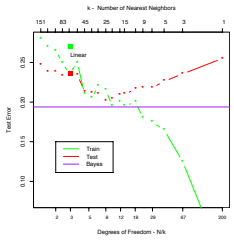



Figure 2.4: *Misclassification curves for the simulation example used in Figures 2.1, 2.2 and 2.3. A single training sample of size* 200 *was used, and a test sample of size* $10,000$*. The red curves are test and the green are training error for* $k$*-nearest-neighbor classification. The results for linear regression are the bigger green and red dots at three degrees of freedom. The purple line is the optimal Bayes Error Rate.*





## Erwartungswert von $Y$ bei $k$ Nächsten Nachbarn

- Der Erwartungswert von $Y$, $E(Y) = \sum_{i=1}^{N} y_i p_i$, geht bei linearen Modellen in den Fehler ein: $EPE(\hat{f}) = E(Y - \hat{f}(X))^2$.
- $k$NN verwendet den Erwartungswert von $Y$ direkt zur Vorhersage, allerdings beschränkt auf die Nachbarschaft $E(Y) = \frac{1}{k} \sum_{\vec{x}_i \in N_k(\vec{x})}^{k} y_i$.
- Für die Vorhersage sind wir an bedingten Wahrscheinlichkeiten interessiert $P(Y|X = \vec{x})$.
- Bei $k$NN wird die bedingte Wahrscheinlichkeit auf die Nachbarschaft begrenzt $E(Y|\vec{x}_i \in N_k(\vec{x}))$.
- Gerechnet wird dies mit Hilfe Gleichung (11).





## Asymptotisches Ergebnis zu $k$NN

- Wenn $k/N$ gegen 0 und $N, k$ gegen $\infty$ konvergieren, konvergiert auch $\hat{f}(x)$ gegen $E(Y|X = x)$. (Hastie/etal/2001, S. 19)
- Haben wir also schon (wieder) den perfekten Lernalgorithmus gefunden?

## Fluch der hohen Dimension bei $k$NN

- Die Dichte der Beispiele ist proportional zu $N^{\frac{1}{p}}$.
- Schon bei $p = 10$ brauchen wir 80% der möglichen Werte jedes Attributs $X_i$, um wenigstens 10% der Daten in einer Nachbarschaft gesehen zu haben!
- Die Dichte der Datenpunkte in der Nachbarschaft ist bei hoher Dimension furchtbar spärlich.
  - $N^{\frac{1}{p}}$ ist bei 100 Beispielen und $p = 10$ nur $100^{1/10} = \sqrt[5]{10}$.
  - Wenn 100 Beispiele bei $p = 1$ einen dichten Raum ergeben, muss man für die selbe Dichte bei $p = 10$ schon $100^{10}$ Beispiele sammeln: $100^{1/1} = 100, 100^{10 \cdot \frac{1}{10}} = 100$





## Bias und Varianz bei $k$NN

- Wenn man die richtige, dicht besetzte Nachbarschaft hat, verzerrt $k$NN die Vorhersage nicht (kleiner Bias).
- Wenn - wie bei hohen Dimensionen - die Nachbarschaft wild variiert, schwankt auch die Güte der Vorhersage (große Varianz).





## Bias und Varianz – bildlich

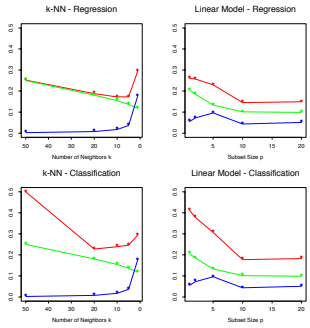



Figure 7.3: *Prediction error (red), squared bias (green) and variance (blue) for a simulated example. The top row is regression with squared error loss; the bottom row is classification with* 0–1 *loss. The models are k-nearest neighbors (left) and best subset regression of size p (right). The variance and bias curves are the same in regression and classi-*





## Bias, Varianz und Modellkomplexität – bildlich

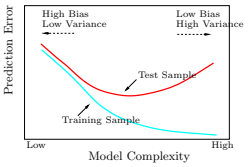



Figure 7.1: *Behavior of test sample and training sample error as the model complexity is varied.*

- Dieser Zusammenhang von Training-/Testfehler und Komplexität bestimmt alle Lernverfahren.
- Kreuzvalidierung lasst abschätzen, wie gut das Modell zu den Daten passt (Modellselektion).





## Was wissen Sie jetzt?

- Sie kennen den Fluch der hohen Dimension bei kNN: kleiner Bias, aber hohe Varianz.
- Bei linearen Modellen war es umgekehrt: kleine Varianz, aber hoher Bias (falls die Annahme des linearen Zusammenhangs von $X, Y$ nicht stimmt).