

# Vorlesung Maschinelles Lernen

## Additive Modelle

Katharina Morik

LS 8 Künstliche Intelligenz Fakultät für Informatik  
Technische Universität Dortmund

4.11.2008

## Gliederung

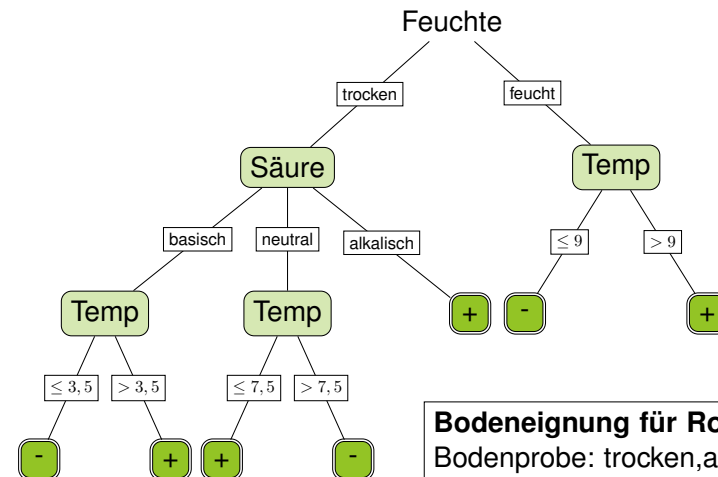
- 1 **Baumlerner**
  - Merkmalsauswahl
  - Implementierung
  - Gütemaße und Fehlerabschätzung
- 2 **Basisexpansionen und Strafterm**
  - Stückweise Funktionen
  - Glätten
- 3 **Generelle Additive Modelle**

## Aufteilen der Beispiele und Modellierung jeder Region

Von globalen zu lokalen Modellen:

- Lineare Modelle können als Vorverarbeitung Basisfunktionen für einzelne Merkmale verwenden.
- Generelle additive Modelle passen die Merkmale einzeln an die Daten an.
- **Baumlerner** teilen den Merkmalsraum in Rechtecke auf und passen in jedem ein Modell an. Dabei wird die Wahl des Merkmals in der rekursiven Aufteilung automatisch bestimmt.
- kNN teilt den Raum der Beispiele bei einer Anfrage  $x$  in die Nachbarschaft von  $x$  und den Rest auf.

## Klassifizieren mit Entscheidungsbäumen



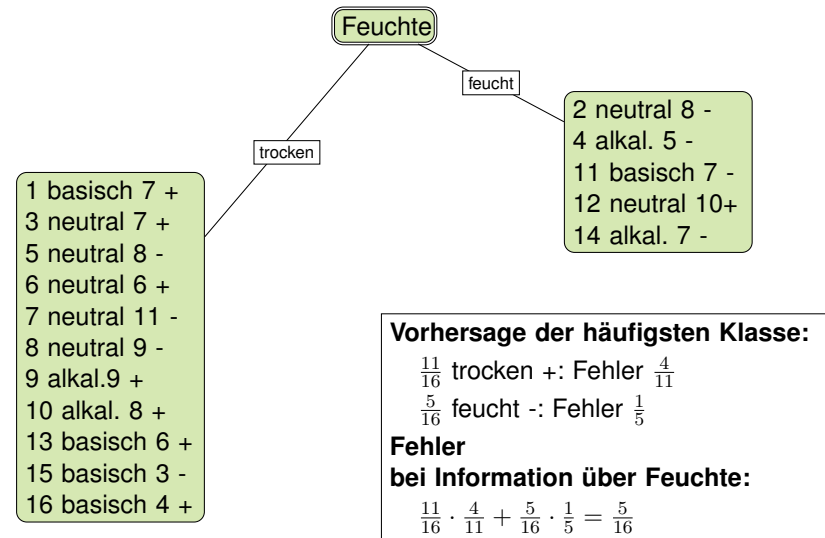
**Bodeneignung für Rotbuchen:**  
Bodenprobe: trocken,alkalisch,7  
wird als geeignet klassifiziert (+)

## Lernen aus Beispielen

+				-			
ID	Feuchte	Säure	Temp	ID	Feuchte	Säure	Temp
1	trocken	basisch	7	2	feucht	neutral	8
3	trocken	neutral	7	4	feucht	alkal.	5
6	trocken	neutral	6	5	trocken	neutral	8
9	trocken	alkal.	9	7	trocken	neutral	11
10	trocken	alkal.	8	8	trocken	neutral	9
12	feucht	neutral	10	11	feucht	basisch	7
13	trocken	basisch	6	14	feucht	alkal.	7
16	trocken	basisch	4	15	trocken	basisch	3

Ohne weiteres Wissen können wir als Vorhersage immer - sagen. Der Fehler ist dann 8/16.

## Aufteilen nach Bodenfeuchte



## Bedingte Wahrscheinlichkeit

- Wahrscheinlichkeit, dass ein Beispiel zu einer Klasse gehört, gegeben der Merkmalswert

$$P(Y|X_j) = P(Y \cap X_j)/P(X_j)$$

- Annäherung der Wahrscheinlichkeit über die Häufigkeit
- Gewichtung bezüglich der Oberklasse
- Beispiel:  $Y = \{+, -\}, X_j = \{feucht, trocken\}$

$$P(+|feucht) = 1/5, P(-|feucht) = 4/5 \text{ gewichtet mit } 5/16$$

$$P(+|trocken) = 7/11, P(-|trocken) = 4/11 \text{ gewichtet mit } 11/16$$

Wahl des Merkmals mit dem höchsten Wert (kleinsten Fehler)

## Information eines Merkmals

- Wir betrachten ein Merkmal als Information.
- Wahrscheinlichkeit  $p_+$ , dass das Beispiel der Klasse + entstammt.  $I(p_+, p_-) = (-p_+ \log p_+) + (-p_- \log p_-)$  Entropie
- Ein Merkmal  $X_j$  mit k Werten teilt eine Menge von Beispielen  $\mathbf{X}$  in k Untermengen  $\mathbf{X}_1, \dots, \mathbf{X}_k$  auf. Für jede dieser Mengen berechnen wir die Entropie.

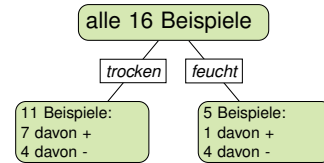
$$Information(X_j, \mathbf{X}) := - \sum_{i=1}^k \frac{|\mathbf{X}_i|}{|\mathbf{X}|} I(p_+, p_-)$$

- Der Informationsgewinn ist die Differenz zwischen der Entropie der Beispiele mit und ohne die Aufteilung durch  $X_j$ .

## Feuchte

Güte des Attributs Feuchte mit den 2 Werten *trocken* und *feucht*:

$$\begin{aligned}
 & - \left[ \underbrace{\frac{11}{16} \cdot I(+, -)}_{\text{trocken}} + \underbrace{\frac{5}{16} \cdot I(+, -)}_{\text{feucht}} \right] \\
 = & - \left[ \underbrace{\frac{11}{16} \cdot \left( -\frac{7}{11} \cdot \log\left(\frac{7}{11}\right) - \frac{4}{11} \cdot \log\left(\frac{4}{11}\right) \right)}_{\text{trocken}} + \underbrace{\frac{5}{16} \cdot \left( -\frac{1}{5} \cdot \log\left(\frac{1}{5}\right) - \frac{4}{5} \cdot \log\left(\frac{4}{5}\right) \right)}_{\text{feucht}} \right] = -0,27
 \end{aligned}$$

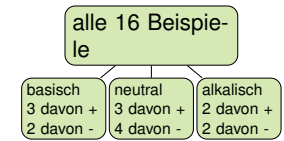


## Säure

Güte des Attributs Säure mit den 3 Werten basisch, neutral und alkalisch:

$$\begin{aligned}
 & - \left( \underbrace{\frac{5}{16} \cdot I(+, -)}_{\text{basisch}} + \underbrace{\frac{7}{16} \cdot I(+, -)}_{\text{neutral}} + \underbrace{\frac{4}{16} \cdot I(+, -)}_{\text{alkalisch}} \right) \\
 & = -0,3
 \end{aligned}$$

**basisch**  $-\frac{3}{5} \cdot \log\left(\frac{3}{5}\right) - \frac{2}{5} \cdot \log\left(\frac{2}{5}\right)$   
**neutral**  $-\frac{3}{7} \cdot \log\left(\frac{3}{7}\right) - \frac{4}{7} \cdot \log\left(\frac{4}{7}\right)$   
**alkalisch**  $-\frac{2}{4} \cdot \log\left(\frac{2}{4}\right) - \frac{2}{4} \cdot \log\left(\frac{2}{4}\right)$



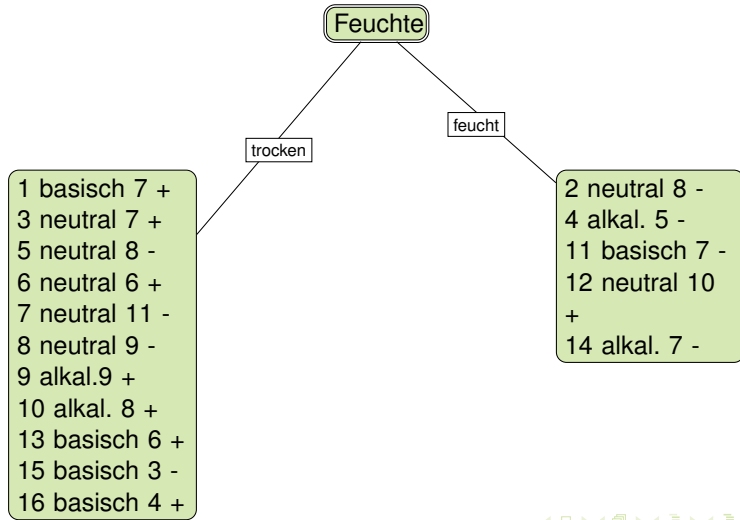
## Temperatur

- Numerische Merkmalswerte werden nach Schwellwerten eingeteilt.
  - 9 verschiedene Werte in der Beispielmenge, also 8 Möglichkeiten zu trennen.
  - Wert mit der kleinsten Fehlerrate bei Vorhersage der Mehrheitsklasse liegt bei 7.
  - 5 Beispiele mit  $\text{Temp} < 7$ , davon 3 in +, 11 Beispiele  $\text{Temp} \geq 7$ , davon 6 in -.
- Die Güte der Temperatur als Merkmal ist  $-0,29$ .

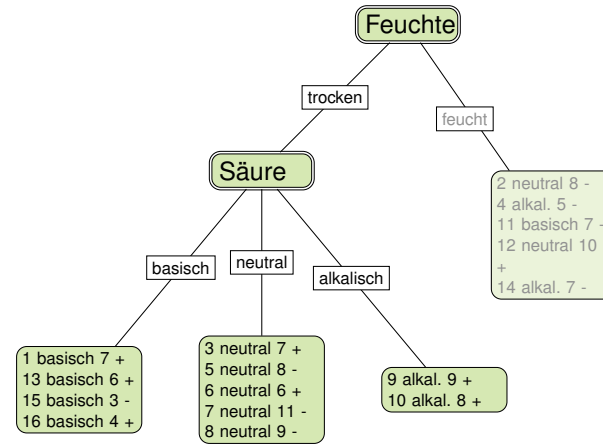
## Merkmalsauswahl

- Gewählt wird das Merkmal  $X_j$ , dessen Werte am besten in (Unter-)mengen  $X_i$  aufteilen, die geordnet sind.
- Das Gütekriterium **Information** (Entropie) bestimmt die Ordnung der Mengen.
- Im Beispiel hat *Feuchte* den höchsten Gütewert.

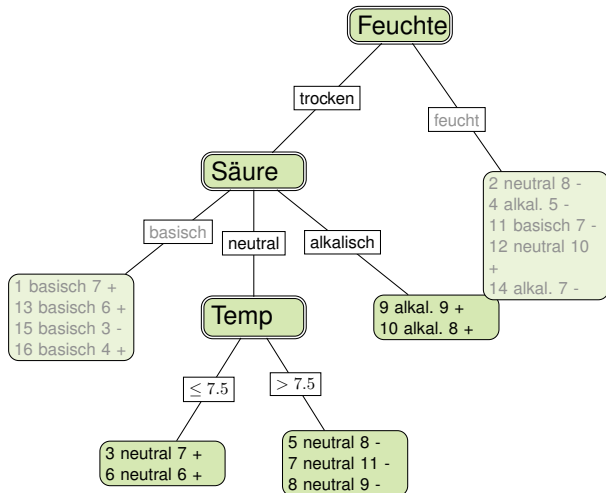
# Algorithmus Top Down Induction of Decision Trees (TDIDT, hier: ID3) am Beispiel



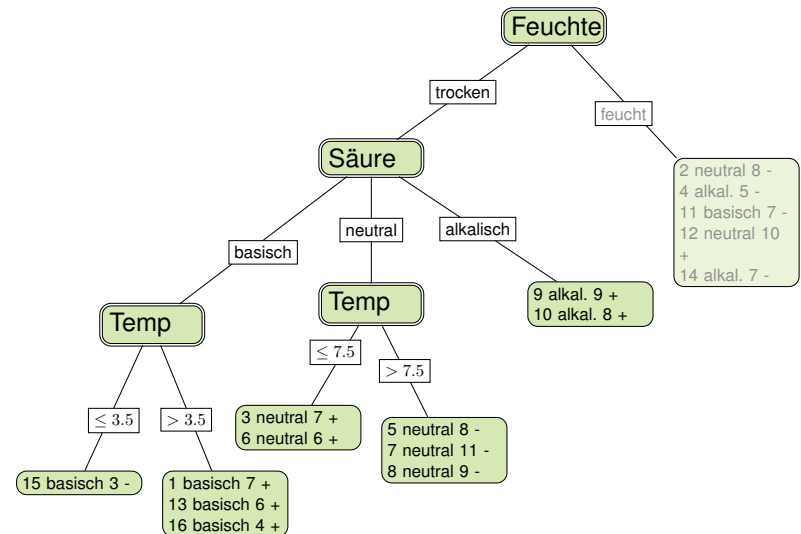
# Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel



# Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel



# Algorithmus TDIDT (ID3) am Beispiel



## Algorithmus ID3 (TDIDT)

Rekursive Aufteilung der Beispielmenge nach Merkmalsauswahl:

- 1  $TDIDT(\mathbf{X}, \{X_1, \dots, X_p\})$
- 2  $\mathbf{X}$  enthält nur Beispiele einer Klasse  $\rightarrow$  fertig
- 3  $\mathbf{X}$  enthält Beispiele verschiedener Klassen:
  - $Güte(X_1, \dots, X_p, \mathbf{X})$
  - Wahl des besten Merkmals  $X_j$  mit  $k$  Werten
    - Aufteilung von  $\mathbf{X}$  in  $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_k$
    - für  $i = 1, \dots, k$ :  
 $TDIDT(\mathbf{X}_i, \{X_1, \dots, X_p\} \setminus X_j)$
  - Resultat ist aktueller Knoten mit den Teilbäumen  $T_1, \dots, T_k$

## Komplexität TDIDT ohne Pruning

Rekursive Aufteilung der Beispielmenge nach Merkmalsauswahl:

- Bei  $p$  (nicht-numerischen) Merkmalen und  $N$  Beispielen ist die Komplexität  $\mathcal{O}(pN \log N)$ 
  - Die Tiefe des Baums sei in  $\mathcal{O}(\log N)$ .
  - $\mathcal{O}(N \log N)$  alle Beispiele müssen "in die Tiefe verteilt" werden, also:  $\mathcal{O}(N \log N)$  für ein Merkmal.
  - $p$  mal bei  $p$  Merkmalen!

## Was muss man implementieren?

```
import com.rapidminer.example.Attribute;
import com.rapidminer.example.ExampleSet;
split(ExampleSet exampleSet, Attribute attribute)
```

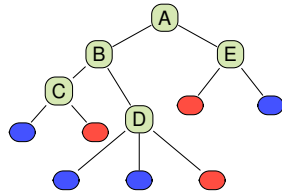
- Die Beispielmenge gemäß der Attributwerte aufteilen.
- Das Attribut auswählen, das zur Partitionierung einer Beispielmenge genutzt wird.
  - Information (Entropie) für alle Attribute berechnen.
- Bei numerischen Attributen den numerischen Wert bestimmen, der die Beispiele am besten aufteilt.

## Implementieren in RapidMiner

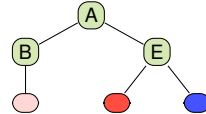
- $\mathbf{X}$ : ExampleSet mit den Methoden u.a.
  - `size()` – gibt die Anzahl der Beispiele zurück
  - `getAttributes()` – liefert die Attribute zurück, über `getAttributes().size()` läßt sich die Anzahl ermitteln
  - `iterator()` – liefert einen Iterator über die Beispiele
- $\vec{x}_i$ : ein Beispiel (Example) mit den Methoden u.a.
  - `getValue(a)` – gibt den Wert des Attributs  $a$
  - Mit `getAttributes().iterator()` läßt sich über die Attribute eines Examples iterieren
- $X_j$ : Methoden für Werte nominaler Merkmale :
  - Nominale Merkmale werden durch ein Mapping von double-Werten auf Strings realisiert. Für ein nominales Attribut liefert `getMapping()` das Mapping für dieses Attribut.
  - `getMapping().size()` liefert die Anzahl der unterschiedlichen Werte des Attributs
  - `getLabel()` – liefert den Wert des Zielmerkmals als double

## Stutzen

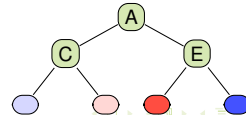
- Überanpassung des Baums an die Trainingsdaten verringern!
- Verständlichkeit erhöhen!
- Stutzen (Pruning):
  - a) Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen
  - b) Einen Teilbaum eine Ebene höher ziehen
- Schätzen, wie sich der wahre Fehler beim Stutzen entwickelt.



a) Knoten an Stelle eines Teilbaums setzen



b) Einen Teilbaum eine Ebene höher ziehen



## Stutzen durch Fehlerschätzen

- Wenn der Fehler eines Knotens kleiner ist als die Summe der Fehler seiner Unterknoten, können die Unterknoten weggelassen werden.
- Dazu müssen wir (bottom-up) die Fehler an allen Knoten schätzen.
- Obendrein sollten wir berücksichtigen, wie genau unsere Schätzung ist. Dazu bestimmen wir ein Konfidenzintervall.
- Wenn die obere Schranke der Konfidenz in den Fehler beim oberen Knoten kleiner ist als bei allen Unterknoten zusammen, werden die Unterknoten gestutzt.

## Was ist ein Konfidenzintervall?

### Konfidenzintervall

Vorgegeben eine tolerierte Irrtumswahrscheinlichkeit  $\alpha$ , gibt das Konfidenzintervall

$$P(u \leq X \leq o) = 1 - \alpha$$

an, dass  $X$  mit der Wahrscheinlichkeit  $1 - \alpha$  im Intervall  $[u, o]$  liegt und mit der Wahrscheinlichkeit  $\alpha$  nicht in  $[u, o]$  liegt.

Meist wird das Konfidenzintervall für den Erwartungswert gebildet. Beispiel  $\alpha = 0, 1$ : Mit 90% iger Wahrscheinlichkeit liegt der Mittelwert  $\bar{X}$  im Intervall  $[u, o]$ , nur 10% der Beobachtungen liefern einen Wert außerhalb des Intervalls.

## z-Transformation in eine standard-normalverteilte Zufallsvariable

Die Zufallsvariable  $X$  wird bezüglich ihres Mittelwerts  $\bar{X}$  standardisiert unter der Annahme einer Normalverteilung:

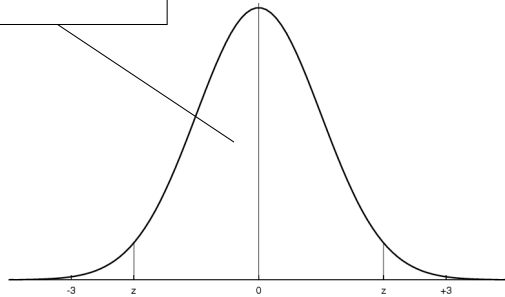
$$Z = \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \sim \mathcal{N}(0; 1)$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, dass der Mittelwert im Intervall liegt, ist nun:

$$P\left(-z \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right) \leq \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \leq z \left(1 - \frac{\alpha}{2}\right)\right) = 1 - \alpha$$

## Verteilung mit z-Werten

Fläche unter der Glocke in  $[-z, z] = c$



- $P(-z \leq X \leq z) = 1 - \alpha$  Konfidenzniveau  
Wahrscheinlichkeit, dass  $X$  mit Mittelwert 0 im Intervall der Breite  $2z$  liegt ist  $1 - \alpha$ .
- $z$  kann nachgeschlagen werden (z.B. Bronstein), wobei wegen Symmetrie nur angegeben ist:  $P(X \geq z)$

## Fehler oder Erfolg schätzen

- Bei den Entscheidungsbäumen beobachten wir nur zwei Werte  $Y \in \{+, -\}$ .
- Wir haben eine Binomialverteilung mit wahrer Wahrscheinlichkeit  $p_+$  für  $y = +$  (Erfolg).
- Beobachtung der Häufigkeit  $f_+$  bei  $N$  Versuchen.  
Varianz:

$$\sigma^2 = \frac{f_+(1-f_+)}{N}$$

Erwartungswert:

$$E(p_+) = f_+/N$$

- In das allgemeine Konfidenzintervall  $[\bar{X} - z(1 - \alpha/2) \frac{\sigma}{\sqrt{N}}; \bar{X} + 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}]$  setzen wir diese Varianz ein und erhalten:

$$\left[ f_+ - z(1 - \alpha/2) \frac{\sqrt{f_+(1-f_+)}}{N}; f_+ z(1 - \alpha/2) \frac{\sqrt{f_+(1-f_+)}}{N} \right]$$

## Rechnung für reellwertige Beobachtungen und Mittelwert

Wir wollen ein bestimmtes Konfidenzniveau erreichen, z.B. 0,8.

- $P(X \geq -z) P(X \leq z)$  ist dann  $(1 - 0,8)/2 = 0,1$ .
- Der  $z$ -Wert, für den die Fläche der Glockenkurve zwischen  $-z$  und  $z$  genau  $1 - \alpha = 0,8$  beträgt, ist das  $(1 - \frac{\alpha}{2})$ -Quantil der Standardnormalverteilung, hier: 1,28 (nachschlagen).
- Das standardisierte Stichprobenmittel liegt mit der Wahrscheinlichkeit 0,8 zwischen  $-1,28$  und  $+1,28$ .

$$\begin{aligned} 0,8 &= P(-1,28 \leq \frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{N}}} \leq 1,28) \\ &= P(-1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \bar{X} - \mu \leq 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) \\ &= P(\bar{X} - 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \leq \mu \leq \bar{X} + 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}) \end{aligned}$$

Das Intervall ist  $[\bar{X} - 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}; \bar{X} + 1,28 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}]$ .

## Konfidenz bei Binomialverteilung

Allgemein berechnet man die obere und untere Schranke der Konfidenz bei einer Binomialverteilung für ein Bernoulli-Experiment:

$$p_+ = \frac{f_+ + \frac{z^2}{2N} \pm z \sqrt{\frac{f_+}{N} - \frac{f_+^2}{N} + \frac{z^2}{4N^2}}}{1 + \frac{z^2}{N}}$$

Hierzu muss lediglich die Häufigkeit  $f_+$  gezählt werden,  $N, z$  bekannt sein.

Diese Abschätzung für den Erfolg können wir symmetrisch für den Fehler ( $p_-$ ) durchführen.

## Anwendung zum Stutzen

- Für jeden Knoten nehmen wir die obere Schranke (pessimistisch):

$$p_- = \frac{f_- + \frac{z^2}{2N} + z \sqrt{\frac{f_-}{N} - \frac{f_-^2}{N} + \frac{z^2}{4N^2}}}{1 + \frac{z^2}{N}}$$

- Wenn der Schätzfehler eines Knotens kleiner ist als die Kombination der Schätzfehler seiner Unterknoten, werden die Unterknoten weggestutzt. Die Kombination wird gewichtet mit der Anzahl der subsumierten Beispiele.

## Gütemaße

- Konfusionsmatrix:

tatsächlich	Vorhergesagt +	Vorhergesagt -	
+	True positives <i>TP</i>	False negatives <i>FN</i>	Recall: $TP/(TP + FN)$
-	False positives <i>FP</i>	True negatives <i>TN</i>	
	Precision: $TP/(TP + FP)$		

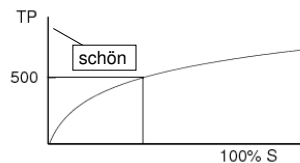
- Accuracy:  $P(\hat{f}(x) = y)$  geschätzt als  $(TP + TN)/total$

## Balance von FP und FN

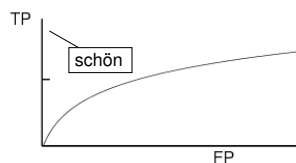
- F-measure:  $\frac{\beta \cdot recall \cdot precision}{recall + precision} = \frac{\beta TP}{\beta TP + FP + FN}$

- Verlaufsformen:

- Lift: *TP* für verschiedene Stichprobengrößen *S*



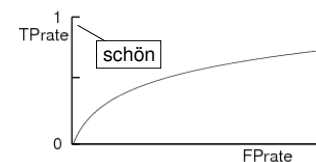
- Receiver Operating Characteristic (ROC): für verschiedene *TP* jeweils die *FP* anzeigen



## ROC genauer

- Statt der absoluten Anzahl *TP* nimm die Raten von true oder false positives – ergibt eine glatte Kurve.

- Für jeden Prozentsatz von falschen Positiven nimm eine Hypothese *h*, deren Extension diese Anzahl von *FP* hat und zähle die *TP*.
- $TP_{rate} := TP/P \sim recall$  bezogen auf eine Untermenge
- $FP_{rate} := FP/N \sim FP/FP + TN$  bezogen auf Untermenge





## Kosten von Fehlern

- Nicht immer sind FP so schlimm wie FN
  - medizinische Anwendungen: lieber ein Alarm zu viel als einen zu wenig!
- Gewichtung der Beispiele:
  - Wenn FN 3x so schlimm ist wie FP, dann gewichte negative Beispiele 3x höher als positive.
  - Wenn FP 10x so schlimm ist wie FN, dann gewichte positive Beispiele 10x höher als negative.
- Lerne den Klassifikator mit den gewichteten Beispielen wie üblich. So kann jeder Lerner Kosten berücksichtigen!

## Was wissen Sie jetzt?

- Sie kennen den Algorithmus ID3 als Beispiel für TDIDT.
- Für das Lernen verwendet ID3 das Gütemaß des Informationsgewinns auf Basis der Entropie.
- Man kann abschätzen, wie nah das Lernergebnis der unbekanntes Wahrheit kommt → Konfidenz
- Man kann abschätzen, wie groß der Fehler sein wird und dies zum Stutzen des gelernten Baums nutzen.
- Lernergebnisse werden evaluiert:
  - Einzelwerte: accuracy, precision, recall, F-measure
  - Verläufe: Lift, ROC

Diese Evaluationsmethoden gelten nicht nur für Entscheidungsbäume!

## Ausgangspunkt: Funktionsapproximation

- Die bisher vorgestellten Lernverfahren, sind Instanzen der Funktionsapproximation.
- Gegeben sind die Trainingsbeispiele  $\mathcal{T}$ , gesucht ist eine Funktion

$$f_{\theta}(x) = \sum_{m=1}^M h_m(x)\theta_m$$

- Dabei gibt es Parameter  $\theta$ , die abzuschätzen sind, bei den linearen Modellen ist dies  $\hat{\beta}$ .
- Darüber hinaus können die Daten durch Basisfunktionen in einen Raum transformiert werden, der für das Lernen besser geeignet ist:  $h_m(x)$ .
- Jetzt gehen wir auf  $h_m(X) : \mathcal{R}^p \rightarrow \mathcal{R}$  ein.

## Einfachste Basisfunktion: Stückweise Konstant

Einteilung von  $X$  in Intervalle durch

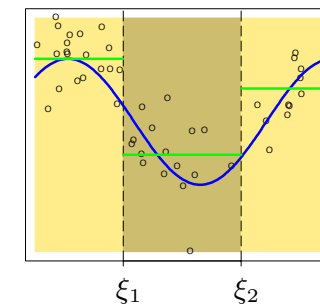
$$h_1(X) = I(X < \xi_1), h_2(X) = I(\xi_1 \leq X < \xi_2),$$

$$h_3(X) = I(\xi_2 \leq X).$$

Als lineares Modell ergibt sich der Durchschnitt von  $Y$  im

jeweiligem Intervall:  $f(X) = \sum_{m=1}^3 \hat{\beta}_m h_m(X)$

Piecewise Constant



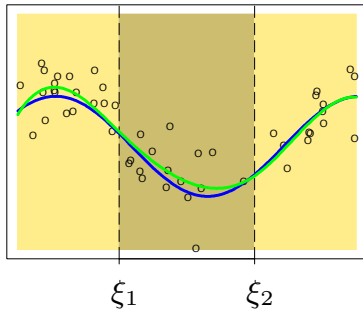
## Stückweise kubisches Polynom

Kontinuierliche, differenzierbare Funktionen (1. und 2. Ableitung) ergeben glattere Annäherung:

$$h_1(X) = X^0, h_3(X) = X^2, h_5(X) = (X - \xi_1)_+^3$$

$$h_2(X) = X^1, h_4(X) = X^3, h_6(X) = (X - \xi_2)_+^3$$

Continuous Second Derivative



## Kubische Splines und Verallgemeinerung

- Für ein Polynom 3. Grades (Ordnung  $M = 4$ ) brauchen wir 4 Basisfunktionen  $h_i$ .
- Dazu kommen Basisfunktionen für die Stützstellen. Beim kubischen Polynom hatten wir  $K = 2$  Stützstellen  $\xi$  mit jeweils einer kubischen Funktion  $h_i(X)$ .
- Allgemein haben die polynomielle Basisfunktionen die Form

$$h_j(X) = X^{j-1}, j = 1, \dots, M$$

$$h_{M+l}(X) = (X - \xi_l)_+^{M-1}, l = 1, \dots, K$$

- Polynomielle Basisfunktionen heißen **Splines**.

## Regression Splines

- Funktionen, die sich an Werte in vorgegebenen Intervallen anpassen, heißen **Regression Splines**.
- Die Anzahl und Lage der Stützstellen  $\xi_i$  muss vorgegeben werden.
- Die Funktionen weichen jenseits der Stützstellen sehr vom wahren Wert ab.
- Verbesserung: **natürliche Splines**, bei denen jede Funktion jenseits der Intervallgrenzen als linear angenommen wird.

## Natürliche kubische Splines

- Das Modell mit kubischem Spline:

$$f(X) = \sum_{j=0}^3 \beta_j X^j + \sum_{k=1}^K \theta_k (X - \xi_k)_+^3$$

- Die Bedingung der Linearität bedeutet: jenseits der Intervallgrenzen darf nur  $X^1$  betrachtet werden. Dies impliziert Beschränkungen (constraints):

$$\beta_2 = 0, \quad \beta_3 = 0$$

$$\sum_{k=1}^K \theta_k = 0, \quad \sum_{k=1}^K \xi_k \theta_k = 0$$

- Dadurch reduziert sich die Menge der Basisfunktionen.

Basisfunktionen der natürlichen kubischen Splines

Der natürliche kubische Spline mit  $K$  Stützstellen ist durch  $K$  Basisfunktionen gegeben.

$$N_1(X) = X^0,$$

$$N_2(X) = X^1,$$

$$N_{k+2}(X) = d_k(X) - d_{k-1}(X), \quad k = 1, \dots, K$$

$$d_k(X) = \frac{(X - \xi_k)_+^3 - (X - \xi_K)_+^3}{\xi_K - \xi_k}$$

Glätten erfordert keine Wahl und Platzierung der Trennungen

- Natürliche kubische Splines mit allen Beispielen  $x_i, i = 1, \dots, N$  als Trennungen hätten zu viele Freiheitsgrade zu bestimmen.
- Mit einem Strafterm für die Krümmung wird aber die Komplexität begrenzt.
- Wir minimieren

$$RSS(f, \lambda) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f''(t))^2 dt \quad (1)$$

$\lambda$  gewichtet den Strafterm:  $\lambda = 0$  erlaubt alle Funktionen,  $\lambda = \infty$  erlaubt nur noch das lineare Modell mit kleinstem RSS – also gar keine Basisfunktionen.

Optimierungsproblem mit Glättung

$$\hat{f}(x) = \sum_{j=1}^N N_j(x) \hat{\theta}_j$$

wobei  $N_j(x)$  eine Menge von  $N$  Basisfunktionen für das Beispiel  $x$  ist. Es gibt ein eindeutiges Optimum für natürliche kubische Splines mit allen  $x_i$  als Trennstellen. Wir erhalten eine  $N \times N$ -Matrix: eine Zeile je Beispiel; da jetzt  $K = N$  ist, eine Spalte je Basisfunktion.

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} N_1(x_1) & N_2(x_1) & \dots & N_N(x_1) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ N_1(x_i) & \dots & \dots & N_N(x_i) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ N_1(x_N) & \dots & \dots & N_N(x_N) \end{pmatrix}$$

$RSS(f, \lambda)$  soll minimiert werden.

Lösung des Optimierungsproblems mit Glättung

Das Qualitätskriterium (Gleichung 1)

$$RSS(f, \lambda) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f''(t))^2 dt$$

lässt sich vereinfachen zu

$$RSS(\theta, \lambda) = (\mathbf{y} - \mathbf{N}\theta)^T (\mathbf{y} - \mathbf{N}\theta) + \lambda \theta^T \mathbf{\Omega}_N \theta \quad (2)$$

wobei  $\{\mathbf{N}\}_{ij} = N_j(x_i)$  und  $\{\mathbf{\Omega}_N\}_{jk} = \int N_j''(t) N_k''(t) dt$   
Die Lösung ist dann

$$\hat{\theta} = (\mathbf{N}^T \mathbf{N} + \lambda \mathbf{\Omega}_N)^{-1} \mathbf{N}^T \mathbf{y} \quad (3)$$

Beispiel

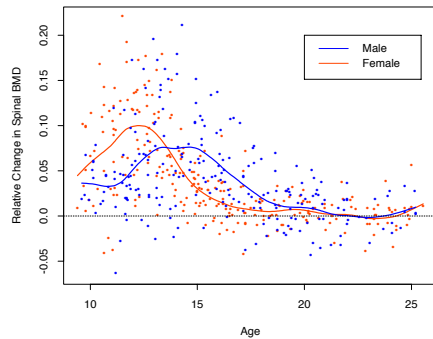


Figure 5.6: The response is the relative change in bone mineral density measured at the spine in adolescents, as a function of age. A separate smoothing spline was fit to the males and females, with  $\lambda \approx 0.00022$ . This choice corresponds to about 12 degrees of freedom.

Glättungsmatrix  $S_{\lambda}y$

Eine Glättung mit vorher bestimmtem  $\lambda$  ist ein linearer Glättungsoperator.

$$S_{\lambda}y = \hat{f} = N(N^T N + \lambda \Omega_N)^{-1} N^T y \quad (4)$$

$S_{\lambda}$  ist die Glättungsmatrix.

- $S_{\lambda}$  ist eine symmetrische und semidefinite Matrix.
- $S_{\lambda}$  hängt nur von  $x_i$  und  $\lambda$  ab.
- $S_{\lambda}$  ist linear in  $y$ .
- Der Freiheitsgrad ist die Summe der Diagonalelemente von  $S_{\lambda}$ , bezeichnet  $df_{\lambda} = trace(S_{\lambda})$ .

Was wissen Sie jetzt?

- Wir haben eine Methode gesehen, Nichtlinearität zu berücksichtigen. Die Daten werden durch Basisexpansionen umgeformt und erst danach linear modelliert.
- Insbesondere haben wir das kubische Polynom gesehen – noch höhere Exponenten ergeben für das menschliche Auge keine Verbesserung der Glättung.
- Die Fehlerminimierung mit Basisexpansion und Strafterm (Gleichungen (1) und (2)) ergibt bei fester Gewichtung  $\lambda$  des Strafterms eine **Glättungsmatrix  $S_{\lambda}$** .

Generelle additive Modelle

- Lineare Modelle passen eine Hyperebene an alle Daten an. Die Hyperebene wird dann auf verschiedene Weisen zur Vorhersage genutzt.
- Basisfunktionen können Nichtlinearität ausdrücken: nach ihrer Anwendung wird dann mit einem linearen Modell vorhergesagt.
- Das Modell selbst kann aber auch nichtlinear sein! Die allgemeine Form genereller additiver Modelle für die Regression:

$$E(Y|X_1, X_2, \dots, X_p) = \alpha + f_1(X_1) + f_2(X_2) + \dots + f_p(X_p) \quad (5)$$

- Jedes  $f_i$  sei hier ein kubischer Spline.

## Fehlerminimierung bei generellen additiven Modellen

Eben haben wir das Glätten jeweils für ein Merkmal bei der Funktionsapproximation gesehen mit der Fehlerminimierung beim Glätten einer Funktion (Gleichung 1):

$$RSS(f, \lambda) = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f''(t))^2 dt$$

Bei generellen additiven Modellen müssen wir parallel  $p$  Funktionen anpassen:

$$PRSS(\alpha, f_1, \dots, f_p) = \sum_{i=1}^N \left[ y_i - \alpha - \sum_{j=1}^p f_j(x_{ij}) \right]^2 + \sum_{j=1}^p \lambda_j \int f_j''(t_j)^2 dt_j \quad (6)$$

Jede Funktion  $f_j$  ist ein natürlicher kubischer Spline für  $X_j$  mit Trennungen an den Werten  $x_{ij}, i = 1, \dots, N$ .

## Annahmen für die Optimierung

Um eine eindeutige Lösung der Fehlerminimierung zu finden, nehmen wir an:

$$\forall j : \sum_{i=1}^N f_j(x_{ij}) = 0$$

Dann ist  $\hat{\alpha} = \text{Mittelwert}(y_i)$ .

Falls die  $N \times N$ -Matrix der Beispiele nichtsingulär ist (invertierbar, die Determinante der Matrix ist  $\det(\mathbf{N}) \neq 0$ ), hat Gleichung (6) eine eindeutige Lösung.

Das Optimierungsproblem ist dann konvex.

## Backfitting Verfahren ( $\mathbf{X}, \mathbf{S}, \tau$ )

- 1  $\hat{\alpha} := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i$ ; For  $j=1$  until  $p$  do  $stable_j := 0$ ;
- 2 Iterator  $j$  über allen Merkmalen  $M \setminus \text{Fertig}$ 
  - If  $stable_j > \tau$ ,  
return  $\hat{f}_j$ ;  $\text{Fertig} := \text{Fertig} \cup \hat{f}_j$ ; Goto 2;
  - For  $i=1$  until  $N$

$$\hat{f}_j := S_j \left[ y_i - \hat{\alpha} - \sum_{k=1, k \neq j}^p \hat{f}_k(x_{ik}) \right]$$

% Bei Anpassung von  $\hat{f}_j$  alle anderen  $\hat{f}_k$  verwenden!

- If  $\hat{f}_j$  did not change,  $stable_j++$ ;

- 3 If  $M \neq \{\}$ , Goto 2; else stop.

## Was wissen Sie jetzt?

- Sie haben gesehen, dass auch das Modell selbst zusammengesetzt sein kann aus an die Beispiele angepassten Glättungsfunktionen.
- Solche Modelle heißen **additive Modelle**.
- Diese Modelle müssen die Glättungsfunktionen für alle Merkmale gleichzeitig anpassen.
- Sie haben den **Backfitting Algorithmus** dafür gesehen.
- Es gibt noch andere additive Modelle und deren Lernverfahren, z.B. additive logistische Regression.