

Übungen zur Vorlesung

Praktische Optimierung, SoSe 2024

Prof. Dr. Günter Rudolph, Dr. Marco Pleines

<http://ls11-www.cs.tu-dortmund.de/people/rudolph/teaching/lectures/P0KS/SS2024/lecture.jsp>

Blatt Präsenz 7

18./20.06.2024

Abgabe: keine

Polynomielle Metamodelle und Bias-Variance-Tradeoff

Betrachten Sie die Funktion $f : [0, 5] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = x^2 \cos(x) + \sin(5x)$. Für diese Funktion sollen nun polynomielle Metamodelle angepasst und verglichen werden. Dabei sei ein polynomielles Metamodell vom Grad k gegeben durch

$$p_k(x) = \theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \dots + \theta_k x^k.$$

Die Koeffizienten $\theta_0, \dots, \theta_k$ werden anhand von Punktepaaaren $(x, f(x))$ geschätzt. Wir betrachten die Grade $k = 1, \dots, 6$.

(a) Für jeden Grad $k \in \{1, \dots, 6\}$ wiederholen Sie das folgende Prozedere 100 Mal:

- Ziehen Sie $n = 15$ Werte für x gleichverteilt aus dem Intervall $[0, 5]$ und werten Sie f in diesen Punkten aus.
- Anhand dieser Daten passen Sie ein polynomielles Metamodell vom Grad k an.

Visualisieren Sie die 100 Metamodelle für jeden Wert von k und zeichnen Sie jeweils auch die wahre Funktion f ein. Zeichnen Sie zusätzlich die Vorhersagen ein, die sich ergeben, wenn jeweils über alle 100 Modelle gemittelt wird.

(b) Bekanntlich gilt

$$\mathbb{E}((\hat{f}(x) - f(x))^2) = (\mathbb{E}(\hat{f}(x)) - f(x))^2 + \mathbb{E}((\hat{f}(x) - \mathbb{E}(\hat{f}(x)))^2),$$

wobei der erste Summand den Bias und der zweite die Varianz der Schätzung $\hat{f}(x)$ angibt. Schätzen Sie für jeden Grad k für jeden Wert x , in dem Sie ihre Metamodelle auswerten, Bias und Varianz. Stellen Sie Bias und Varianz in Abhängigkeit des Grades k grafisch dar. Was fällt auf?

Hinweis: Nutzen Sie das Paket *sklearn* (Achtung: `pip install scikit-learn`). Folgende Funktionen können hilfreich sein:

```
from sklearn.pipeline import Pipeline
from sklearn.preprocessing import PolynomialFeatures
from sklearn.linear_model import LinearRegression
```

Hinweis: In Moodle steht für Sie ein Template zur Verfügung.