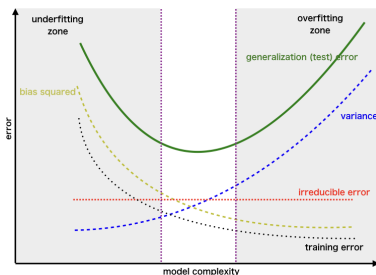


1 Grundlagen

- Grundlagen
 - $Y = f(x) + \epsilon$
 - $Y = \text{Zielgröße}$, $f() = \text{unbekanntes/wahres Modell}$, $X = \text{Prädiktoren}$, ϵ Nicht reduzierbarer Fehler
 - $\hat{Y} = \hat{f}(X) + \epsilon$
 - $\hat{Y} = \text{Schätzung der Zielgröße}$, $\hat{f} = \text{Schätzung des Modells}$
 - Ziel: Möglichst genaue Schätzung finden
- Ziel:
 - Prediction (Vorhersage von Werten)
 - Inference (Ursachenanalyse, wie wirken sich Änderungen aus)
- Bias-Variance Tradeoff
 - Bias: Fehler des Modells durch falsche Annahmen der Realität
 - Variance: Fähigkeit des Modells auf anderen Subsets gleich gute Modelle zu erzeugen bzw. Fehleranfälligkeit bei Änderungen in Trainingsdaten
 - TrainingError: Wird immer kleiner, da Modell sich immer besser anpasst
 - TestError: Wird erst kleiner, steigt dann aber wieder (Overfitting)
 - Nichtreduzierbarer Error: Bleibt immer gleich (Messfehler etc.)



2 Regression

- Modellgüte:
 - Schätzung der Parameter β_0 und β_1 über kleinste Quadrate
 - * $\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}) * (y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$
 - * $\beta_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x}$

- * Erwartungstreue: $E(\hat{\beta}_0) = \beta_0$ und $E(\hat{\beta}_1) = \beta_1$
- $RSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$
- $RSE = \sqrt{\frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}$ (Zielgröße weicht im Durchschnitt RSE Einheiten von der Regressionsgeraden ab)
- $R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS}$, je größer desto besser $0 \leq R^2 \leq 1$ (Var(Zielwert) wird durch $R^2\%$ der Prädiktoren erklärt)
- $R^2_{adj} = 1 - \frac{(1-R^2)(N-1)}{N-p-1}$ Adjustiert mit Anzahl der Prädiktoren
- Standardfehler und Intervalle
 - * $Var(\epsilon) = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$
 - * $(SE(\hat{\beta}_0))^2 = Var(\epsilon) * (\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2})$
 - * $(SE(\hat{\beta}_1))^2 = \frac{Var(\epsilon)}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$
- * Intervallschätzung: $[\hat{\beta}_1 - 2 * SE(\hat{\beta}_1), \hat{\beta}_1 + 2 * SE(\hat{\beta}_1)]$
- * Interpret: Aus 100 Proben liegt β_1 in 95 Fällen im Intervall
- * 95%-Konfidenzintervall: bezieht sich auf den durchschnittlichen Y Wert
- * 95%-Prognoseintervall: bezieht sich auf den konkreten Wert Y von Ausgangswerten $X_1 \dots$
- t-Test
 - * $H_0 : \beta_0 = 0; H_1 : \beta_1 \neq 0$
 - * X_1 Hat keinen Einfluss auf Y
 - * $t = \frac{\hat{\beta}_1}{SE(\hat{\beta}_1)}$
 - * Einfach den p-Wert ablesen, wenn $< \alpha$ bspw. 0.05 dann H_0 verwerfen
- F-Test
 - * $H_0 : \beta_0 = \beta_1 = \dots = 0$
 - * Alle Prädiktoren haben keinen Einfluss auf Y

- Qualitative Prädiktoren:
 - **Prädiktoren mit 2 Ausprägungen:**
 - DummyVariable aka 0(No) oder 1 (Yes)
 - **Achte auf Normalausprägung von R**
 - $\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 * x_i$
 - Koeffizient β_1 kürzt sich je nach Ausprägung raus
 - **Prädiktoren mit k Ausprägungen:**
 - Erstelle $k - 1$ Dummyvariablen

- Andere ist Normalzustand
- Interaktionseffekte:
 - Synergieeffekte zwischen zwei oder mehreren Variablen
 - $\hat{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \epsilon$
 - Auswirkung erkennen durch Umformung:
 - $\hat{y} = \beta_0 + \beta_2 x_2 + (\beta_1 + \beta_3 x_2) * x_1$
 - Erhöht man x_1 um eine Einheit erhöht sich \hat{y} um $\beta_1 + \beta_3 x_2$ Einheiten
 - x_1 moderiert x_2 und Vice versa
 - Signifikanz über p-value feststellen
 - Interaktion zwischen Quali und Quanti Variablen:
 - Kürzt sich komplett raus (wenn 0) oder ist *1 (wenn 1)

3 Klassifikation

- Grundlagen:
 - Klassifikation ist Zuordnung von bedingten Wahrscheinlichkeiten anhand von Ausprägungen
 - $P(Y = k | X = x)$
 - Klasse mit höchster Wahrscheinlichkeit wird gewählt
 - Bpsw: $Y = 1$ (Yes) und 0 (No)
 - * Lineare Regression, die die Wahrscheinlichkeitsausgabe **funktioniert nicht!**
 - * Reg.Gerade wird unter 0 fitten und auch nicht bis 1
 - Funktion finden, die $0 \leq p(x) \leq 1$ für alle X

- Logistic Regression:
 - $p(x) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 * X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 * X}}$
 - $0 \leq p(x) \leq 1$, da immer $e^x \geq 0$ und $\frac{X}{1+X} \leq 1$
 - Odds:
 - * $\frac{p(x)}{1-p(x)} = e^{\beta_0 + \beta_1 * X}$
 - * $0 \leq odds \leq \infty$
 - * Möglichkeit Wahrscheinlichkeit anzugeben:
 - * Odds = $\frac{4}{3}$ -> "Siegchancen stehen 4 zu 3"
 - * Umrechnung:
 - * $p = \frac{odds}{1+odds} = \frac{e^{logit}}{1+e^{logit}}$

- * $odds = \frac{p}{1-p} = e^{logit}$
- Logits:
 - * $log(\frac{p(x)}{1-p(x)}) = \beta_0 + \beta_1 * X$
 - * $-\infty \leq logits \leq \infty$
 - * Logits hängen Linear von X ab
- **Schätzung der Koeffizienten**
 - Schätzung von β_0 und β_1 über Maximum-Likelihood
 - $l(\beta_0, \beta_1) = \prod_{i: y_i=1} p(x_i) * \prod_{i: y_i=0} (1 - p(x_i))$
 - Funktion wird maximiert = da wo Likelihood am größten ist, sind Parameter am besten
- **Validierung:**
 - Gleiche Werte/ Tests, wie bei linearer Regression
- **Confounding:**
 - Zusammenhang zwischen zwei Prädiktoren
 - Confounder beeinflusst gleichzeitig Zielgröße und anderen Prädiktor
 - **Hier fehlt**

4 Resampling

- Grundlagen:
 - TestError wird mit ungesehenen Daten berechnet.
 - Meist aber keine vorhanden -> TestError muss über Trainingsdaten geschätzt werden
 - Verfahren für Regression/Klassifikation anwendbar
- **Einfache Validierung:**
 - Teile Trainingsdaten in zwei gleiche große Mengen auf
 - Menge1: für Training / Menge2: für Testing
 - MSE variiert stark in Abhängigkeit der Trainingsmenge
 - Modelle sollten möglichst mit hoher Trainingsmenge trainiert werden
 - Hoher Bias, geringe Varianz
- **LeaveOneOut Validierung:**
 - n-Modelle werden mit n-1 Datensätzen trainiert
 - Letzter Datensatz ist Testdatensatz

- Durchschnitt aller MSEs ist finaler Wert
- $CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n MSE_i$
- Vorteil: Größere Trainingsmenge
- Nachteil: Hoher Rechenaufwand für n Modelle, größere Varianz als bei einfacher Val, durch Autokorrelation
- geringer Bias, hohe Varianz
- **k-fold Validierung**
 - Teile Datensatz in k gleich große Mengen (5, 10..)
 - Trainiere k Modelle, wobei immer eine Teilmenge als Test genutzt wird
 - $CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k MSE_i$
 - geringere Streuung des MSEs
 - Guter Kompromiss zwischen Rechenaufwand und guter Abschätzung
- Für Klassifikation wird der Anteil falsch klassifizierter Objekte genommen!

5 Modellauswahl

- p (# Prädiktoren), n (# Beobachtungen)
- Steigende Varianz und sinkender Prognosegüte, wenn p -> n
- Hohe Anzahl an Prädiktoren: Steigende Wahrscheinlichkeit von Multikollinearität (Abhängige Prädiktoren) und unnötige Komplexität
- Wenn $p \geq n$, ist Methode der kleinsten Quadrate gar nicht möglich
- **Best Subset Selection:**
 - Berechne alle Modelle mit k Parametern (Speicher das beste (Min. RSS oder Max. R^2))
 - Berechne für k = 0,1,2 .. x alle besten Modelle
 - Wähle beste aus Besten aus (siehe unten)
 - Hoher Rechenaufwand (2^p Modelle),

Gefahr von Overfitting, findet optimales Modell

- **Forward Stepwise Selection:**
 - Berechne bestes Modell mit 0 Prädiktoren, dann mit 1, etc.
 - Wähle für k immer das beste Modell und gehe von dort aus weiter
 - Wähle beste aus Besten aus
 - Weniger Rechenaufwand (p^2 Modelle), Overfitting unwahrscheinlich, findet nur lokales Optimum
- **Backward Stepwise Selection:**
 - Wie Forward Stepwise Selection nur rückwärts
 - Starte mit Modell mit k Prädiktoren und nimm immer den schlechtesten Weg
 - Wähle beste aus Besten aus
 - Weniger Rechenaufwand (p^2 Modelle), Overfitting unwahrscheinlich, findet nur lokales Optimum
- **Bestes Modell?**
 - R^2 und RSS ist nicht aussagekräftig, da es mit steigender Anzahl an Prädiktoren besser wird.
 - Testfehler indirekt messbar durch (C_p, AIC, BIC und R_{adj}^2) oder direkt durch Kreuzvalidierung
 - Anwendbar bei linearen Modellen
 - $RSS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$
 - n: Anzahl der Beobachtungen, d: Anzahl der Prädiktoren
 - $\sigma^2 = Var(e) = \frac{1}{n-p-1} * RSS$
 - Mallows $C_p = \frac{1}{n} (RSS + 2d\sigma^2)$
 - $AIC = \frac{1}{n\sigma^2} (RSS + 2d\sigma^2)$ (Proportional zu C_p)
 - $BIC = \frac{1}{n\sigma^2} (RSS + \ln(n)d\sigma^2)$ (Höheres Gewicht auf Strafterm für viel Prädik-

toren)

- $R_a^2 = R^2 - \frac{p}{n-p-1} (1 - R^2)$ kann bei Hinzunahme einer Variable auch kleiner und oder negativ werden

6 R - Hilfe

- **Grundlagen:**
 - *set.seed(X)* Setzt Seed für random Number Generator
 - *c(1,2,3,4)* Vektor mit Zahlen 1-4
 - *rep(1 : 10, 100)* Erzeugt Vektor mit zahlen 1-10, 100 mal
 - *rnorm(100)* Erzeugt Vektor mit 100 normalverteilten Werten
 - *runif(X, a, b)* Erzeugt X Zufallszahlen zwischen a und b
 - *df[2,3]* Greift auf Element der 2.Reihe und 3.Spalte des DFs zu
 - *df[, -3]* Entfernt 3. Spalte
 - *head()* Zeigt erste X Zeilen von DF an
 - *summary()* gibt Zusammenfassung von Modellen (DF, Modelle etc.)
 - *table(X, Y)* gibt Tabelle bzw. Konfusionsmatrix aus
 - *nrow(X)* gibt Anzahl der Zeilen in X
 - *sample(n, n/2)* gibt 50% Subsetvektor
 - *is.na(X)* findet/zählt null Values
 - *na.omit(X)* entfernt null Values
 - *var(X), mean(X)* Varianz und Durchschnitt von X
- **Modelle:**
 - *lm(A ~ B + poly(C,2) + BC, data = ..., subset =)* Lineare Regression für A mit Interaktivität von BC und C mit Exponent 2
 - *glm(A ~ B + C, data = ..., family = binomial, subset =)* Logistic Regression

Modell

- *predict(Modell, DataFrame, interval = , type =)*
 - * DF: *data.frame(x1 = c(2), x2 = c(3))*
 - * *interval* Konfidenzintervall(confidence), Prognoseintervall(prediction)
 - * *type* Wahrscheinlichkeit(response), Loggits(ohne Angabe)
- *coef()* Zeigt Koeffizienten des Modells
- *confint()* Zeigt Konfidenzintervalle für Koeff.
- *chisq.test(X, Y)* Macht ChiquadratTest auf Unabhängigkeit von X und Y (H_0 : Merkmale sind unabhängig)
- **Validierung:**
 - *mean((Auto\$mpg - predict(lm.fit2, Auto))[, , type =])* die mittlere quadratische Abweichung
 - aus dem *boot* package
 - *cv.glm(Data, Modell)\$delta[1]* LeaveOneOut (*\$delta[1]* liefert nur ersten Wert also MSE)
 - *cv.glm(Data, Modell, k = X)\$delta[1]* k-fold mit k Folds
 - *regsubsets(Y ~ data, nvmax = , method =)* SubsetSelection (nvmax = Anzahl Attribute, methode= forward/backward/none)
- **Plots:**
 - *pairs()* Zeigt Pärchenplott aller quantitativer Variablen
 - *plot()* Zeigt X/Y Plot zweier Variablen
 - *hist()* Zeigt Histogramm
 - *points()* Erzeugt Punkt im Plot
 - *abline(Modell, col = "red")* Zeigt Regressionslinie
 - *qplot()* aus *ggplot2* für quickplot