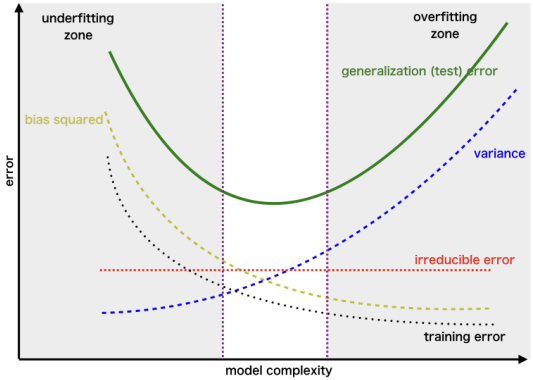
1 Grundlagen

- Grundlagen
  - $Y = f(x) + \epsilon$
  - Y = Zielgröße, $f()$ = unbekanntes/wahres Modell, X = Prädiktoren, ϵ Nicht reduzierbarer Fehler
  - $\hat{Y} = \hat{f}(X) + \epsilon$
  - $\hat{Y}$ = Schätzung der Zielgröße, $\hat{f}$ = 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 Models auf anderen Subsets gleich gute Modelle zu erzeugen bzw. Fehleranfälligkeit bei Änderungen in Traningsdaten
  - TrainingsError: 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 $\beta_0 und \beta_1$ über kleinste Quadrate
    - $\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})*(y_i-\overline{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_1-\overline{x})^2}$
    - $\beta_0 = \overline{y} - \beta_1 \overline{x}$
    - 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
    - $Var(\epsilon) = \frac{1}{n-2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$
    - $(SE(\hat{\beta}_0))^2 = Var(\epsilon) * (\frac{1}{n} + \frac{\overline{x}^2}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2})$
    - $(SE(\hat{\beta}_1))^2 = \frac{Var(\epsilon)}{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2}$
    - 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 Interval
    - 95%-Konfidenzinterval: bezieht sich auf den durchschnittlichen Y Wert
    - 95%-Prognoseinterval: bezieht sich auf den konkreten Wert Y von Ausgangswerten X1…
  - 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 < als bspw. 0.05 dann H_0 verwerfen
  - F-Test
    - $H_0 : \beta_0 = \beta_1 = ... = 0$
    - 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 Qauli udn 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 Wahrscheinlichkeitausgibt 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:
    - $\frac{p(x)}{1-(px)} = e^{\beta_0+\beta_1*X}$
    - $0 \leq odds \leq \infty$
    - 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:
    - $log(\frac{p(x)}{1-(px)}) = \beta_0 + \beta_1 * X$
    - $-\infty \leq logits \leq \infty$
    - Logits hängen Linear von X ab
- **Schätzung der Koeffizienten**
  - Schätzung von β_0 und β_1 über Maximum-Likelihood
  - $l(\beta_0, \beta_1) = \Pi_{i:y_i=1} p(x_i) * \Pi_{i:y_i=0}(1 - p(x_i))$
  - Funktion wird maximiert = da wo Likelihood am größten ist, sind Parameter am besten
- **Validierung:**
  - Gleiche Werte/ Tests, wie bei lineare Regression
- **Confounding:**
  - Zusammenhang zwischen zwei Prädiktoren
  - Confounder beeinflusst gleichzeitig Zielgröße und anderen Prädiktor
  - Hier fehlts

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 Valididerung:**
  - Teile Trainingsdaten in zwei gleiche große Mengen auf
  - Menge1: für Training / Menge2: für Testing

  - MSE variiert stark in Abhängikeit der Traininsgmenge
  - Modelle sollten möglichst mit hoher Trainingsmenge trainiert werden
  - Hoher Bias, geringe Varianz
- **LeaveOneOut Validierung:**
  - n-Modelle werden mit n-1 Datensätze 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 Multikollinearitär (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 ($C_p, AIC, BIC und R^2_{adj}$) 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
  - $\sigma^2 = Var(\epsilon) = \frac{1}{n-p-1} * RSS$
  - 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 Prädiktoren)
  - $R^2_a = R^2 - \frac{p}{n-p-1}(1-R^2)$ 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: $data.frame(x1 = c(2), x2 = c(3))$
    - $interval$ Konfidenzinterval(confidence), Prognoseinterval(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:**
  - $mean((Auto\$mpg - predict(lm.fit2, Auto))[-train]^2)$ Berechnet 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
  - $regsubsets(Y\ ., data =, nvmax =, method =)$ Subset-Selection (nvmax = Anzahl Attribute, methode= forward/backward/none)
- **Plots:**
  - $par(mfrow = c(2,2))$ Zeigt 2x2 Matrix mit Plots
  - $pairs()$ Zeigt Pärchenplott aller qantitativer Variabeln
  - $plot(x, y, xlab =, ylab =)$ Zeigt X/Y Plot zweier Variablen mit Achsenbeschriftung
  - $plot(modell)$ zeit Plots zu Residuen etc.
  - $hist()$ Zeigt Histogram
  - $points()$ Erzeugt Punkt im Plot
  - $abline(Modell, col = "red")$ Zeigt Regressionslinie
  - $qplot()$ aus $ggplot2$ für quickplot