Maschinelles Lernen
Zusammenfassung

Thomas Mohr

Contents

1 Grundlagen

1.1 (Un)-überwachtes Lernen

- Eine **überwachte** Lernaufgabe liegt vor, wenn wir Beispiele haben, die das zu lernende Attribut bereits tragen (Zielvariable).
  - **Regression** im Fall von kontinuierlichen Werten (z.B. $\mathbb{R}$) - eigentlich numerisch
  - **Klassifikation** im Fall von diskreten Labeln (z.B. *TRUE, FALSE*; ausgezeichnet, durchschnittlich, schlecht) - eigentlich nominal oder ordinal
- Eine **unüberwachte** Lernaufgabe liegt vor, wenn es kein Attribut gibt, das wir lernen wollen und für das wir bereits Beispiele haben.
  - Clustering, also die Unterteilung der Daten in eine Menge von Gruppen
  - Finden von Ausreißern

1.2 Inkrementelles Lernen

- Anstatt das Modell stets von Null an zu lernen, wird das alte Modell mit neuen Beispielen erweitert.

1.3 Aktives Lernen

- Aktive Lernverfahren erzeugen die Beispiele selbst, d.h., sie sagen dem Benutzer, welches Tupel benötigt wird.

1.4 Data cleansing

- Fehlende Werte auffüllen
- Rauschen aus den Daten entfernen
- Daten glätten
- Ausreißer entfernen
- Identische Tupel identifizieren
- Daten komprimieren

1.5 Datensatz

- Ein Datensatz ist eine Tabelle.
- Eine Instanz (auch Objekt) ist eine Zeile in dieser Tabelle.
- Ein Attribut ist ein Feld, das ein Merkmal des Objekts repräsentiert. Mögliche Arten von Attributen sind:

  - nominal (kategorisch)
    - Keine sinnvolle Ordnung
    - Wir können nicht rechnen (z.B. Mittelwert, Median, Abstände).
  - ordinal (sortierte Kategorien)
    - Sinnvolle Ordnung
    - Der Unterschied zwischen zwei Ausprägungen ist i.d.R. unbekannt.
  - binär
    - Können nur zwei Werte annehmen
  - numerisch
    - Messbare Quantitäten
    - Abstand zwischen zwei Werten kann quantifiziert werden.
    - Auf den Attributen kann gerechnet werden.
    - Wir unterscheiden:
      - diskrete Attribute (endliche oder abzählbar unendliche Menge von womöglichen Ausprägungen)
      - kontinuierliche Werte, reele Zahlen
      - Attribute mit echtem Nullpunkt (Gewicht, Größe)
      - Attribute ohne echten Nullpunkt (Jahresangaben, Temperatur in °C)

- Ein Datensatz besitzt N Instanzen und d Attribute.
  - x_i beschreibt die i-te Instanz.
  - x_{ij} beschreibt das j-te Attribut der i-ten Instanz.
  - x beschreibt einen d-dimensionalen Vektor.
  - Liegt eine überwachte Lernaufgabe vor, so ist das Label der i-ten Instanz t_i.

2 Deskriptive Statistik

2.1 Beschreibung von Daten

- Wir betrachten nun Spalten des Datensatzes, also z.B. Spalte j:

$$X_j = (x_{1j}, \ldots, x_{Nj})$$

2.2 Mittelwert

- Der Erwartungswert (Mittelwert) macht Aussagen zur Lage (dem "Zentrum") der Daten:

$$\mu_j := \sum_{i=1}^{N} x_{ij} \cdot p(x_{ij}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{ij}$$

- Ist eine Gewichtung vorhanden, so kann der gewichtete Mittelwert herangezogen werden:

$$\mu'_j := \frac{\sum_{i=1}^{N} w_i x_{ij}}{\sum_{i=1}^{N} w_i}$$

- Problematisch bei Ausreißern

2.3 Median und Midrange

- Der Median ist der mittlere Wert in der sortierten Folge X_j.
- Das mittlere Element muss nicht existieren.
  - Per Definition wählen wir dann als Median den Wert

$$\frac{1}{2}(x_{\frac{N}{2},j} + x_{\frac{N}{2+1},j})$$

    im Fall numerischer Daten.
  - Im Fall von ordinalen Daten kann der Median das linke oder das rechte Element sein, oder jede mögliche Ausprägung dazwischen.
- Der Midrange ist das arithmetische Mittel von Maximum und Minimum von X_j.

2.4 Modus

- Der Modus ist die am häufigsten vorkommende Ausprägung. Somit ist der Modus auch für nominale Attribute berechenbar.
- Wird die maximale Häufigkeit für mehr als einen Wert angenommen, so gibt es mehr als einen Modus.
- Kommt jede Ausprägung maximal einmal vor, so ist der Modus nicht existent.

2.5 Varianz und Schiefe

- Über einen Vergleich von Modus, Median und Mittelwert können wir (erste) Aussagen zur Schiefe machen.
- Über Maximum und Minimum können wir die Ausbreitung bestimmen.
- Mit dem Moment 2-ter und 3-ter Ordnung können wir beides auch quantisieren.
- Das Moment k-ter Ordnung des j-ten Attributs ist definiert als:

$$m_j^{(k)} = E((X_j - \mu_j)^k)$$

mit $E(X) = \sum_{1 \leq i \leq N} x_{ij} p(x_{ij})$ und μ_j ist Erwartungswert von X_j

2.5.1 Moment k-ter Ordnung

- $k = 1$:?
- $k = 2 : Var(X_j) := E((X_j - \mu_j)^2) = E(X_j^2) - \mu_j^2$
  - Die Varianz gibt die erwartete quadratische Abweichung vom Mittelwert an.
  - Sie ist also ein Maß für die Streuung der Daten (um den Mittelwert).
  - Die Quadratwurzel der Varianz wird als Standardabweichung bezeichnet und mit σ symbolisiert.
- $k = 3 : v(X_j) := E((X_j - \mu_j)^3)$
  - Die Schiefe ist eine Kennzahl für die Asymmetrie einer Verteilung:

$$v(X) = \frac{3(\overline{X} - \tilde{X})}{s}$$

  - $v(X_j) < 0$: Verteilung ist linksschief
  - $v(X_j) > 0$: Verteilung ist rechtsschief
  - $v(X_j) = 0$: Verteilung symmetrisch
- $k = 4 : w(X_j) := E((X_j - \mu_j)^4)$
  - Die Kurtosis ist eine Kennzahl für die Wölbung einer Verteilung:

$$w(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\frac{x_i - \overline{X}}{s})^4$$

  - $w(X) < 0$: Verteilung ist platykurtisch (flachgipflig)
  - $w(X) > 0$: Verteilung ist leptokurtisch (steilgipflig)
  - $w(X) = 0$: Verteilung ist mesokurtisch (normalgipflig)

2.6 Quantil

- Zur Berechnung der Quantile wird X_j zunächst aufsteigend sortiert.
- Das k-te Quantil ist der Wert x aus X_j, so dass maximal $\frac{k}{q}$ der Werte in X_j kleiner als x sind, und $\frac{(q-k)}{q}$ größer; für $0 < k < q$.
- Es gibt somit $(q-1)$ q-Quantile.
- Sei $p := \frac{k}{q}$. Dann ist das k-te q-Quantil von X_j definiert als:

$$x_{pj} := \begin{cases} \frac{1}{2}(x_{Np} + x_{Np+1}) & Np \text{ gerade} \\ x_{\lfloor Np+1 \rfloor} & Np \text{ ungerade} \end{cases}$$

2.6.1 Interquantile range (IQR)

- Ist definiert als $IQR = Q3 - Q1$
- Es gibt an, wie die 50% der mittleren Daten streuen
- Der IQR kann zudem benutzt werden, um Ausreißer zu erkennen.
  - Berechne $\Delta = 1.5 \cdot IQR$
  - Ein Ausreißer ist ein Wert, der
    - kleiner $Q1 - \Delta$ ist.
    - größer $Q3 + \Delta$ ist.
- $Q1, Q2, Q3, IQR$ sowie Minimum und Maximum können graphisch im Boxplot zusammengefasst werden.

2.7 Korrelation zwischen Attributen

- Wir betrachten nun einen (möglichen) Zusammenhang der Spalten X_i und X_j.
- Je nach Attribut existieren unterschiedliche Maße:
  - Korrelationskoeffizienten und Varianz für numerische Daten
  - Rangkorrelationskoeffizienten für ordinale Daten
  - χ^2-Test für nominale Attribute

2.7.1 Kovarianz für numerische Daten

- Erlaubt zu messen, wie startk sich zwei Variablen gemeinsam ändern
- Wir benötigen den Begriff des Erwartungswerts, der hier aber dem Mittelwert entspricht:

$$E(X_j) = \overline{X_j} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} x_{ij}$$

- $Cov(X_i, X_j) = E((X_i - \overline{X_i})(X_j - \overline{X_j})) = E(X_i X_j) - \overline{X_i} \cdot \overline{X_j}$
- Tendieren X_i und X_j dazu sich gemeinsam zu ändern, so ist $Cov(X_i, X_j)$ positiv, bei entgegengesetzter Änderung negativ.
- Das Maß ist nicht normalisiert.

2.7.2 Korrelationskoeffizienten für numerische Daten

- Der Korrelationskoeffizient ist normalisiert im Interval $[-1, 1]$:

$$cor(X_i, X_j) = \frac{Cov(X_i, X_j)}{\sqrt{Var(X_i)}\sqrt{Var(X_j)}}$$

- Wir haben keine Korrelation bei einem Wert von 0.
- Positive (negative) Korrelation liegt bei positiven (negativen) Werten vor.

2.7.3 Rangkorrelationskoeffizient

- Der (Spearman) Rangkorrelationskoeffizient basiert auf den Rängen der Elemente; wir betrachten die Spalten X_i und X_j. Er wird berechnet als:

$$r_s(X_i, X_j) = \frac{\sum_{1 \leq k \leq N}(rank(x_{ki}) - \mu Rank(X_i)) \cdot (rank(x_{kj}) - \mu Rank(X_j)}{\sqrt{\sum_{1 \leq k \leq N}(rank(x_{ki}) - \mu Rank(X_i))^2}\sqrt{\sum_{1 \leq k \leq N}(rank(x_{kj}) - \mu Rank(X_j))^2}}$$

  mit $\mu Rank(X_i)$ ist der mittlere Rang in Spalte i

- Der Rang wird aufsteigend anhand der Werte bestimmt. Der kleinste Wert nimmt dabei Rang 1 ein, der zweitkleinste Rang 2, usw. Tritt ein Wert mehrfach auf, so ergibt sich der Rang aus dem Arithmetischen Mittel.
- rs ist normalisiert in $[-1, 1]$.

2.7.4 χ^2-Test

- Seien $a_1, \ldots, a_c$ die c Werte, die das Attribut X_k aufweist, $b_1, \ldots, b_r$ die r Werte, die wir in der Spalte X_l finden.
- Berechne in o_{ij} die beobachtete Anzahl der Ereignisse, dass X_k den Wert a_i und X_l den Wert b_j gemeinsam annehmen.
- Wir können auch die erwartete Anzahl berechnen (für nicht korrelierte Atrribute):

$$e_{ij} = \frac{1}{N}(|X_k = a_i| \cdot |X_l = b_j|)$$

- Die Pearson χ^2 Statistik kann wie folgt berechnet werden:

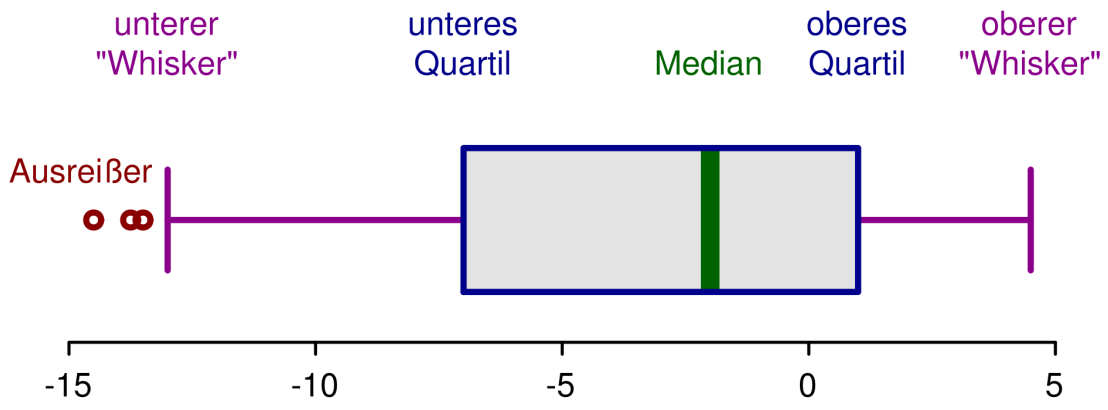
$$\chi^2 = \sum_{i=1}^{c} \sum_{j=1}^{r} \frac{(o_{ij} - e_{ij})^2}{e_{ij}}$$

- Die Statistik testet die Null-Hypothese der Unabhängigkeit zweier Variablen.
- Der Test basiert auf einem Signifikanzniveau mit $(r-1) \cdot (c-1)$ Freiheitsgraden.
  - Das Signifikanzniveau ist die Wahrscheinlichkeit, mit der die Nullhypothese fälschlicherweise verworfen wird kann, obwohl sie eigentlich richtig ist.
- Die Hypothese kann abgelehnt werden, wenn der Wert der Prüfgröße größer ist als das $(1-a)$-Quantil der χ^2 Verteilung.

2.8 Visualisierung

2.8.1 Boxplots

- IQR ist die breite Mitte der Box.
- Das untere Quartil ($X_{0,25}$) ist die untere/linke Kante der Box.
- Das obere Quartil ($X_{0,75}$) ist die obere/rechte Kante der Box.
- Der Median ist durch eine Linie in der Box gekennzeichnet.
- Die langen Enden der Box heißen Whisker und geben die Grenzen für Ausreißer an. Alle Werte die außerhalb der Whisker, und damit des zulässigen Bereichs liegen, heißen Ausreißer.

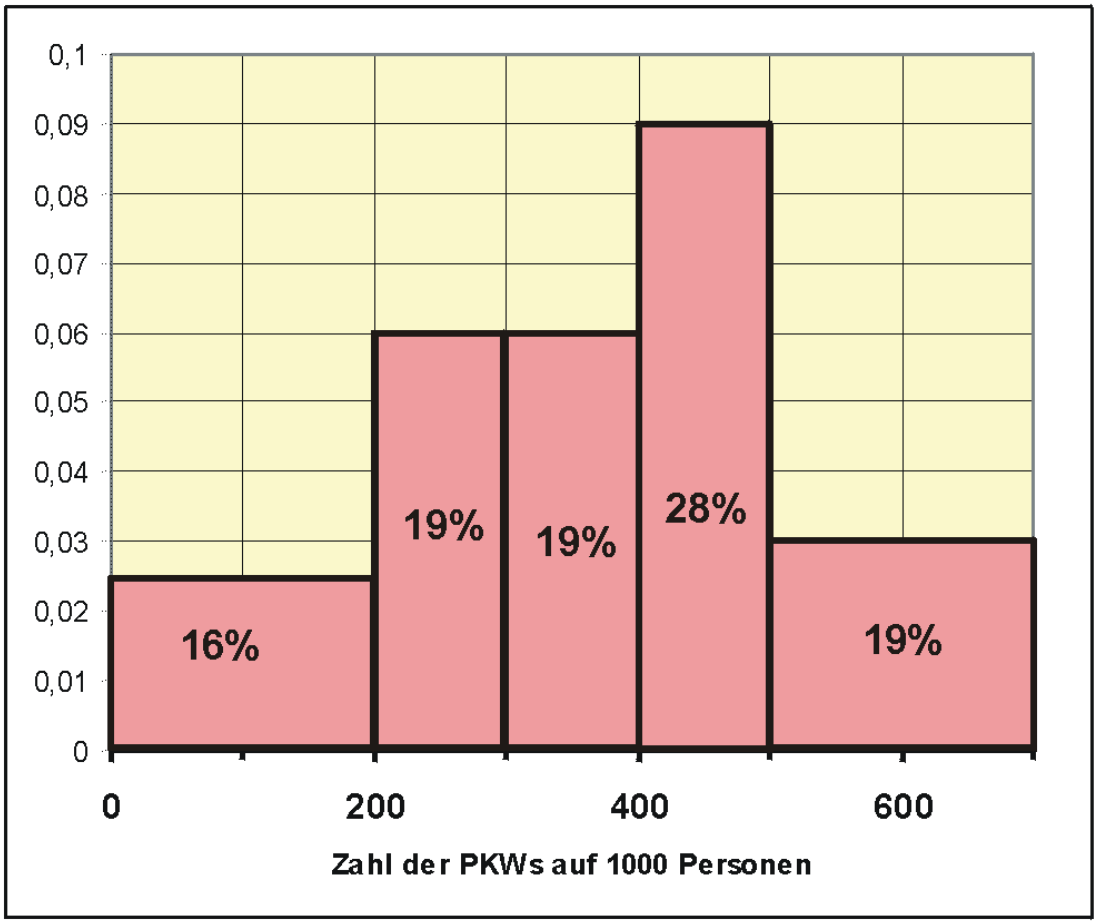


2.8.2 Histogramme

- Werden zur Darstellung von Häufigkeitsverteilungen verwendet.
- Bei numerischen Attributen müssen disjunkte Klassen definiert werden.
  - Die Balkenbreite kann durch zwei Verfahren bestimmt werden:
    - Scott-Regel: $w = \frac{3,49 \cdot \sigma}{\sqrt[3]{N}}$
    - Regel von Diaconis: $w = \frac{2(Q3-Q1)}{\sqrt[3]{N}}$
  - Die Häufigkeit ist proportional zum Flächeninhalt.

Beispiel

Klasse j	Zahl der PKW pro 1000	Anzahl der Länder (absolute Häufigkeit) n_j	Klassen-breite d_j	Rechteckshöhe (Häufigkeitsdichte) $h_j = \frac{n_j}{h_j}$
1	$0 - 200$	5	200	0,025
2	$200 - 300$	6	100	0,06
3	$300 - 400$	6	100	0,06
4	$400 - 500$	9	100	0,09
5	$500 - 700$	6	200	0,03
Summe $\sum$		32		



2.8.3 Quantil-Plots

- Ein Quantil-Plot erlaubt es das Verhalten der Werte eines Attributs abzuschätzen.
- Die Daten im i-ten Attribut werden sortiert und das k-te Element wird abgetragen auf $f_k = \frac{k-0,5}{N}$.

Quantil-Quantil-Plots (qq-Plots)

- Die Quantile einer Verteilung werden gegen die Quartile einer anderen Verteilung abgetragen.
- Die Werte in werden in den Attributen X_i und X_j sortiert.
- Enthalten beide Attribute die gleiche Anzahl an Elementen, so wird x_{ki} auf x_{kj} mit $1 \leq k \leq N$ abgebildet.
- Ansonsten ist $|X_i| < |X_j|$ und nur $|X_i|$ Punkte können geplottet werden:

- x_{ki} ist das $\frac{k-0,5}{|X_i|}$ Quantil.
- Das $\frac{k-0,5}{|X_i|}$ Quantil von X_j muss dann interpoliert werden.

2.9 Distanzen

- Ähnlichkeits- oder Distanzmaß, dass ein Objekt-Paar auf einen numerischen Wert abbildet
- Metrik:
  - Identität: $d(x_i, x_j) = 0 \iff x_i = x_j$
  - Symmetrie: $d(x_i, x_j) = d(x_j, x_i)$
  - Dreiecksungleichung: $d(x_i, x_j) \leq d(x_i, x_k) + d(x_k, x_j)$
  - $d(\cdot, \cdot)$ beschreibt hier ein Funktion und ist nicht mit der Anzahl an Attributen zu verwechseln.
- Eine Distanz kann in eine Ähnlichkeit und umgekehrt umgewandelt werden. Ist $d : 0 \times 0 \to [0, 1]$, so kann $s(x_i, x_j) = 1 - d(x_i, x_j)$ definiert werden.

2.9.1 Distanz auf numerischen Attributen

- Minkowski Abstand (Metrik)

$$d_h(x_i, x_j) = \sqrt[h]{|x_{i1} - x_{j1}|^h + \ldots + |x_{id} - x_{jd}|^h}$$

  - $h = 1$: Manhattan Distanz
  - $h = 2$: Euklidische Distanz
  - Supremum Distanz für $h \to \inf$, die zu $\max_{1 \leq f \leq d} |x_{if} - x_{jf}|$ konvergiert

2.9.2 Distanz auf ordinalen Attributen

- Betrachtung der Ränge und einer darauf basierenden Abbildung.
- Sei M_f die Menge möglicher Ränge für das Attribut f.
- Ersetze Wert x_{if} durch dessen Rang $r_{if} \in \{1, \ldots, M_f\}$.
- Nun kann mit den Rängen gearbeitet werden, allerdings sollte zuvor normalisiert werden:

$$z_{if} = \frac{r_{if} - 1}{M_f - 1} \in [0, 1]$$

- Die z_{if} sind numerisch und können beispielsweise mit der Minkowski Distanz verglichen werden.

2.9.3 Distanz auf nominalen Attributen

- Werden Objekte durch d nominale Attribute beschrieben, so kann die Distanz zwischen x_i und x_j wie folgt berechnet werden

$$d(x_i, x_j) = \frac{d - m}{d}$$

wobei m die Anzahl der Übereinstimmungen ist.

2.9.4 Distanz auf binären Attributen

	1	0	$\sum$
1	q	r	$q + r$
0	s	t	$s + t$
$\sum$	$q + s$	$r + t$	d

- Je nachdem, ob Attribute symmetrisch sind, können zwei verschiedene Distanzen definiert werden.
  - Ist sowohl der Zustand "0" als auch "1" gleichwertig, so definieren wir die Distanz als:
$$d(x_i, x_j) = \frac{r + s}{d}$$
  - Im Fall eines asymmetrischen Attributs tragen die "1"-en die tatsächliche Information; "0"-en sind nicht von Interesse:
$$d)(x_i, x_j) = \frac{r + s}{q + r + s}$$
  - Der Jaccard-Koeffizient ist ein häufig vorkommendes Ähnlichkeitsmaß:
$$s(x_i, x_j) = 1 - d(x_i, x_j) = \frac{q}{q + r + s}$$

2.9.5 Distanz auf gemischten Typen

- Sei d die Anzahl unterschiedlicher Attributstypen:

$$d(x_i, x_j) = \frac{\sum_{f=1}^{d} \delta_{ij}^{(f)} \frac{|x_{if} - x_{jf}|}{\max_{1 \le h \le N} x_{hf} - \min_{1 \le h \le N} x_{hf}}}{\sum_{f=1}^{d} \delta_{ij}^{(f)}}$$

- $\delta_{if}^{(f)}$ ist ein binärer Indikator.
  - Er ist 0, falls (x_{if} oder x_{jf} unbekannt sind, oder wenn) $x_{if} = x_{jf} = 0$ und das binäre Attribut f asymmetrisch ist; ansonsten ist $\delta_{if}^{(f)} = 1$.

2.10 Dimensionsreduktion und Einbettung in den Vektorraum

2.10.1 Multidimensionale Skalierung

- Überführung von Punkten aus einem d-dimensionalen Raum in einen m-dimensionalen Raum ($d > m$) oder metrischer Raum in Vektorraum.
- Die paarweisen Euklidischen Abstände sollen dabei möglichst wenig verändert werden.
- Es gilt:

$$\begin{aligned} d(x_i, x_j)^2 = d_{ij}^2 &= \sum_{k=1}^{d} (x_{ik} - x_{jk})^2 \\ &= \underbrace{\sum_{k=1}^{d} (x_{ik})^2}_{b_{ii}} - 2 \underbrace{\sum_{k=1}^{d} x_{ik} x_{jk}}_{bij} + \underbrace{\sum_{k=1}^{d} (x_{jk})^2}_{b_{jj}} \\ &= b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij} \end{aligned}$$

- Zentriere Daten im Urpsrung: $\sum_{i=1}^{N} x_{ij} = 0 \quad \forall j = 1, \ldots, d$
- Die b_{ij} können zu einer $(N \times N)$-Matrix B zusammengefasst werden. Daher gilt $B = XX^T$.
- X ist die gesuchte Matrix, die den Datensatz durch N Attribut-Vektoren beschreibt und die es nun zu approximieren gilt.
- Spektrale Zerlegung:

$$X = CD^{\frac{1}{2}}$$

  mit C ist die Matrix, deren Spalten den Eigenvektoren von B entsprechen; D ist eine diagonale Matrix mit den Eigenwerten.

2.11 Hauptkomponentenanalyse

- Die Hauptkomponentenanalyse (PCA) projiziert ein Objekt $x \in \mathbb{R}^d$ auf $z \in \mathbb{R}^d$ wie folgt:

$$z = w^T x$$

- Ziel ist es durch eine Projektion die Varianz auf den neuen Attributen $Z_1, \ldots, Z_d$ zu maximieren.
- Tatsächlich beträgt dabei die Korrelation zwischen allen Paaren (Z_i, Z_j) auch 0.
- Gesucht ist ein neuer $m(< d)$ dimensionaler Raum, auf dem die Daten mit minimalem Informationsverlust projiziert werden können.

3 Regression

- Es liegen numerische Daten vor.
- Es existiert eine Zielvariable, die wir aus den anderen hervorgesagt werden soll.
- Ein Modell
$$f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$$
soll gelernt werden.
- Das Problem wird als
  - univariat bezeichnet, falls $d = 1$.
  - multivariat bezeichnet, falls $d > 1$.
- Ein Modell $y(x)$ muss bewertet werden können.
- Dazu wird eine Fehlerfunktion $L : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ benötigt, die den Fehler auf den zukünftigen Eingaben misst.
- Eine gängige Wahl für die Regression ist der quadratische Fehler:
$$(y(x), t) \to (y(x) - t)^2$$
- Das Risiko (der erwartete Fehler) kann somit wie folgt angegeben werden:
$$R(y) = E[L] = \int L(t, y(x))dP(x, t)$$
- Dieses Risiko kann jedoch nicht berechnet werden.

3.1 Bewertung und Fehler

- Die Approximation $R(y) = \int L(t, y(x))dP(x, t)$ führt zum empirischen Risiko:
$$\begin{aligned} R_{emp}(y) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(y(x_i), t_i) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (y(x_i) - t_i)^2 \end{aligned}$$
- Dieser Ausdruck kann ausgewertet werden. Es wird eine Funktion (ein Modell) $y : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ gesucht, die das empirische Risiko minimiert.

3.1.1 Fitten eines Polynoms

- Nun wird der multivariate Fall betrachtet ($x_{i0} = 1$ für $1 \leq i \leq N$).
  - Somit wird eines neues Attribut X_0 hinzugefügt, mit Wert 1 für jede Instanz.

$$\begin{matrix} X_0 & \dots & X_d \end{matrix}$$
$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & x_{1d} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & x_{Nd} \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} y(x_i, w) &= w_0 x_{i0} + w_1 x_{i1} + w_2 x_{i2} + \ldots + w_d x_{id} \\ &= \sum_{j=0}^{d} w_j x_{ij} \end{aligned}$$

- Nun muss das optimale w gefunden werden, also jenes, für das

$$R_{emp}(w) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} L(y(x_i), t_i)$$

  minimiert wird.

- Gesucht wird also $w^* = A^{-1}y$ mit:

$$A = \begin{pmatrix} \sum_i x_{i0}x_{i0} & \sum_i x_{i1}x_{i0} & \sum_i x_{i2}x_{i0} & \dots & \sum_i x_{id}x_{i0} \\ \sum_i x_{i0}x_{i1} & \sum_i x_{i1}x_{i1} & \sum_i x_{i2}x_{i1} & \dots & \sum_i x_{id}x_{i1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_i x_{i0}x_{id} & \sum_i x_{i1}x_{id} & \sum_i x_{i2}x_{id} & \dots & \sum_i x_{id}x_{id} \end{pmatrix}$$

$$w = \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_d \end{pmatrix}$$

$$y = \begin{pmatrix} \sum_i t_i x_{i0} \\ \sum_i t_i x_{i1} \\ \sum_i t_i x_{i2} \\ \vdots \\ \sum_i t_i x_{id} \end{pmatrix}$$

- Die Berechnung kann effizienter gestaltet werden durch $w^* = (D^T D)^{-1} D^T t$ mit:

$$D = \begin{pmatrix} x_{i0} & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1d} \\ x_{i0} & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{i0} & x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nd} \end{pmatrix}$$

$$t = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ \vdots \\ t_N \end{pmatrix}$$

3.2 Overfitting

- Es wird nicht nur das durch die Daten zugrundeliegende Modell, sondern auch das Rauschen, gelernt.
- Jedoch soll ein Modell erzeugt werden, das gut generalisiert.
- Es kann ein Regularisierungsterm verwendet werden, um hohe Koeffizienten zu bestrafen:

$$R'(w) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} (y(x_i, w) - t_i)^2 + \frac{\lambda}{2} \|w\|^2$$

- Ein $\lambda = 0$ führt zu dem alten Ansatz; je größer λ, desto stärker werden hohe Koeffizienten bestraft.
- Es soll eine gute Generalisierung erreicht werden, demzufolge muss

$$\int L(t, y(x)) dP(x, t)$$

  minimiert werden.
- Es wird ein Datensatz zum Lernen und einer zum Validieren benötigt.
- Ist nur ein Datensatz gegeben, so kann die k-fold Kreuzvalidierung Anwendung finden.
- Eine weitere Methode (bei wenigen Daten) ist das Bootstrapping.

3.3 k-fold Kreuzvalidierung

- Die Daten werden zufällig permutiert und in k (annähernd) große Buckets verteilt.
- Es wird beginnend bei $i = 1$ das Bucket i beiseite gelegt.
- Die verbleibenden Buckets werden als Trainingsdaten verwendet; das beiseite gelegte als Testdatensatz.
- Somit ergeben sich k Ergebnisse, mit denen die Modelle bewertet werden können.
- Aggregierung z.B. durch Mittelwert und Standardabweichung führt zu Punktschätzer.

3.4 Evalutation der Modelle

3.4.1 Wilcoxon Test

- Es werden zwei Stichproben danach getestet, ob
  - der Mittelwert der einen Stichprobe kleiner-gleich dem Mittelwert der anderen Probe ist (einseitiger Test):

    $$H_0 : \mu_1 \leq \mu_2$$

    und

    $$H_1 : \mu_1 > \mu_2$$

  - die Mittelwerte identisch sind (zweiseitiger Test):

    $$H_0 : \mu_1 = \mu_2$$

    und

    $$H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$$

- Für den Test müssen folgende Stichprobenvariablen berechnet werden ($R_{\cdot,1}$ ist der Vektor der empirischen Fehler der ersten Parametrisierung, $R_{\cdot,2}$ analog):

$$D_i = R_{i,1} - R_{i,2}$$

- Berechnet werden folgende Werte:

$$\begin{aligned} rg_i &= rang(|D_i|) \\ W_+ &= \sum_{i=1}^{N} \mathbb{I}_{R_{i,1},-R_{i,2}>0} rg_i \\ W_- &= \sum_{i=1}^{N} \mathbb{I}_{R_{i,1},-R_{i,2}<0} rg_i \\ W = \mathbb{I}_q &= \begin{cases} 1 & q \\ 0 & \neg q \end{cases} \end{aligned}$$

- Gilt $R_{i,1} - R_{i,2} = 0$, so wird das Paar keinem der Werte W_+ und W_- zugeordnet.

Beispiel

R_1	R_2	D_i	$\|D_i\|$	rg_i	W_+	W_-
5	8	-3	3	2,5		2,5
3	10	-7	7	5		5
15	12	3	3	2,5	2,5	
25	20	5	5	4	4	
18	19	-1	1	1		1

- Berechne Minimum aus den Summen von W_+ und W_-:

$$\min\{6.5, 8.5\} = 6.5$$

- $\forall i. R_{i,1} - R_{i,2} \neq 0 \implies n = N = 5$

3.4.2 Bootstrapping

- Bei sehr kleinen Datensätzen würden die Folds (Kreuzvalidierung) sehr klein werden.
- Daher werden zufällig N gleichverteilte Instanzen aus dem Datensatz der Größe N gezogen; das Ziehen erfolgt mit Zurücklegen.
- Diese Prozedur kann k-mal wiederholt werden, um mehrere Trainings- und Testdatensätze zu erzeugen.
- Es gilt:

$$\underbrace{(1 - \frac{1}{N})^N}_{\substack{\text{Instanz } x_i \text{ wird nach} \\ N \text{ Ziehungen nicht gezogen}}} \approx e^{-1}$$

$$= 0,368$$

- Somit enthält der Trainingsdatensatz $63,2\%$ der Instanzen.

4 Klassifikation

4.1 Fehler bei Klassifizierung

- Auf analoge Weise zur Regression ergibt sich das Risiko für die Klassifikation:

$$\sum_k \sum_j \int_{R_j} L_{kj} P(x, k) dx$$

  - k, j sind Klassen

  - R_j sind Klassenregionen
  - Der Fehler kann asymmetrisch sein

- Erneut kann das Risiko nicht ausgewertet werden und daher wird der empirische Fehler (mit $\hat{t}_i$ ist prognostizierte Klasse) bestimmt:

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} L_{\hat{t}_i,t_i} \overset{\text{symmetrische Variante}}{\approx} \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathbb{I}_{t_i \neq \hat{t}_i}$$

4.2 k-NN Klassifizierer

- Anstatt ein Modell zu lernen, werden im Beispiel der Trainingsdaten die k ähnlichsten Objekte gesucht, und damit k Ausprägungen des zu lernenden Attributs.
- Basierend auf den k Ausprägungen wird eine Mehrheitsentscheidung getroffen.
- Dazu wird ein geeignetes Ähnlichkeitsmaß benötigt, z.B. ein passendes h bei der Minkowski-Distanz.
- Bei großen Datensätzen kann der k-NN Klassifizierer ineffizient werden.

4.2.1 Verdichtungstechniken

- Bestimmte Instanzen definieren stückweise lineare Funktionen (Voronoi-Diagramm), die zur Klassifikation gebutzt werden können.
- Die Instanzen werden greedy bestimmt; Ausgang ist 1-NN.
  1. Initial ist die Menge Z der gesuchten Instanzen leer
  2. Durchlaufen der Instanzen x des Datensatzes in jedem neuen Zyklus in neuer zufälliger Reihenfolge (bis Z stabil ist) und betrachte x_i:
     a) Finde das Element x_j in Z, das die minimale Distanz zu x_i ausweist (ist Z noch leer, so füge x_i zu Z hinzu).
     b) Weist x_i nicht das selbe Label auf wie x_j, so füge x_i zu Z hinzu.

4.3 Fehler bei binärer Klassifizierung

- Andere Maße vergleichen
  - *wahr positiv* (tp)
  - *wahr negativ* (tn)
  - *falsch positiv* (fp)
  - *falsch negativ* (fn)

	Predicted class		
True class	Positive	Negative	Total
Positive	tp: true positive	fn: false negative	p
Negative	fp: false positive	tn: true negative	n
Total	p'	n'	N

- Die ROC-Kurve trägt für verschiedene Parametrisierungen eines Algorithmus (z.B. Loss-Matrix) $\frac{fp}{n}$ gegen $\frac{tp}{p}$ ab.
- Interessant ist vor allem die AUC, also die Fläche unter der ROC-Kurve. Ist diese eins, so liefert der Klassifizierer ein optimales Ergebnis.

4.4 Entscheidungsbäume

- Der Entscheidungsbaum ist ein hierarchisches Modell.
- Es werden lokale Regionen durch eine Sequenz von Aufteilungen identifiziert.
- Jeder Knoten definiert eine Testfunktion mit einem diskreten Ergebnis.
- Es wird an der Wurzel gestartet und ein Durchlauf entlang eines Pfades bis zum Blatt wird gestartet.
- Die Baum-Induktion erfolgt durch eine Stichprobe (Trainingsdaten); die Verfahren sind greedy und suchen in jedem Schritt die lokal beste Aufteilung.
- Die Zahl der Elemente, die Knoten m erreichen, sei N_m (in der Wurzel ist diese Zahl N).
- $N_m^{(i)}$ der Elemente gehört zu Klasse C_i und somit gilt:

$$\sum_i N_m^{(i)} = N_m$$

- Die Schätzung am Knoten m beträgt:

$$\begin{aligned}\hat{P}(C_i \mid x, m) &\equiv p_m^{(i)} \\ &= \frac{N_m^{(}i)}{N_m}\end{aligned}$$

- Ein Knoten ist rein, wenn die Schätzung entweder 0 oder 1 ist.
- Bei reinen Knoten ist keine weitere Zerlegung notwendig; es wird ein Blatt gebildet.
- Eine Möglichkeit zur Messung der Unreinheit ist die Entropie:

$$I_m = -\sum_{i=1}^{k} p_m^{(i)} \log_2 p_m^{(i)}$$

mit $\lim\limits_{n\to 0} n \log_2 n = 0$ und daher $0 \log_2 0 \stackrel{def}{=} 0$.

- Eine uniforme Verteilung hat eine höhere Entropie als eine nicht-uniforme Verteilung.

Beispiel

- Betrachtet wird der Knoten m (zu Beginn die Wurzel).
  - Welches Attribut soll zur nächsten Verzweigung gewählt werden?
  - Es werden univariate Bäume verwendet; multivariate bringen im Allgemeinen keine Vorteile.
- Angenommen es wird das Attribut $a, 1 \leq a \leq d$ betrachtet.
  - Ist es numerisch, gibt es zwei Verzweigungen gemäß Test $x_{ia} \leq \theta_0$.
  - Ist es diskret, so gibt es so viele Verzweigungen, wie das Attribut (verschiedene) Ausprägungen hat.
  - Es gibt im Allgemeinen v Verzweigungen.
- Von den N_m Elementen, die Knoten m erreichen, nehmen N_{mj} die j-te der v Verzweigungen, $N_{mj}^{(i)}$ davon gehören zur Klasse i.
- Für die Kinder von m können die Wahrscheinlichkeiten für die Klasse i ermittelt werden, für Kind j gilt insbesondere:

$$\begin{aligned}\hat{P}(C_i \mid x, m, j) &\equiv p_{mj}^{(i)} \\ &= \frac{N_{mj}^{(i)}}{N_{mj}}\end{aligned}$$

- Würde im Attribut a verzweigt werden, so ergibt sich bei einem k-Klassen Problem eine neue Entropie von:

$$I'_m = -\sum_{j=1}^{v} \frac{N_{mj}}{N_m} \cdot \sum_{i=1}^{k} p_{mj}^{(i)} \log_2 p_{mj}^{(i)}$$

5 Probabilistische Verfahren

- Es werden nun Wahrscheinlichkeitsverteilungen auf den Attributen und der Zielvariable betrachtet.
- Gegeben ist ein univariater Datensatz, anhand dessen Kunden, basierend auf dem Attribut *Einkommen* X_1, auf Kreditwürdigkeit hin klassifiziert werden sollen.
- Die Kreditwürdigkeit kann durch eine Bernoulli Variable dargestellt werden, bedingt durch die Variable X_1.
- $C = 1$ entspricht dabei hohem Ausfallrisiko, und $C = 0$ einem geringem Ausfallrisiko

- Wäre $P(C \mid X_1)$ bekannt, so könnte für einen neuen Kunden x_{N+1} basierend auf $P(C = 1 \mid x_{N+1,1}) > 0.5$ eine Entscheidung getroffen werden.
- Es könnte sogar die Fehlerwahrscheinlichkeit

$$1 - \max\{P(C = 0 \mid x_{N+1,1}, x_{N+1,2}), P(C = 1 \mid x_{N+1,1}, x_{N+1,2})\}$$

  berechnet oder eine Ablehnungsoption verwendet werden.

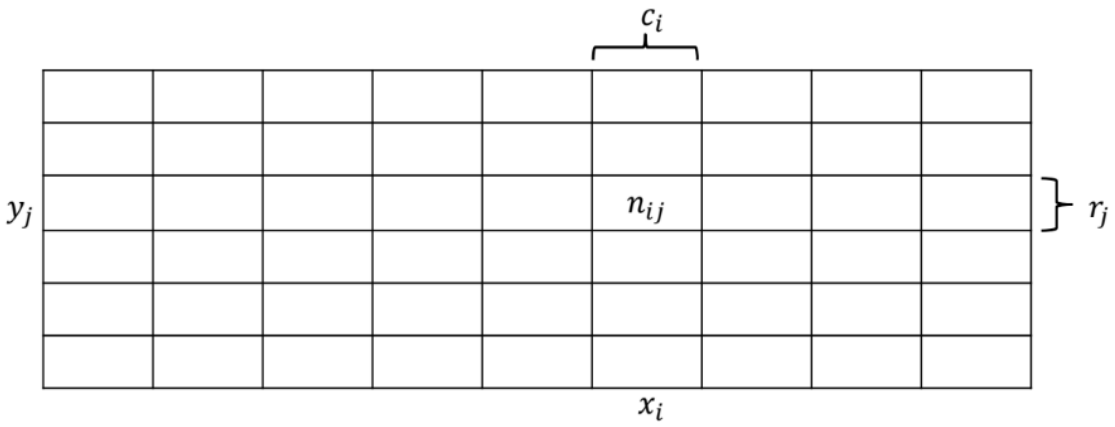
5.1 Satz von Bayes

- Mit dem Satz von Bayes kann $P(C \mid x)$ berechnet werden:

$$P(C \mid x) = \frac{P(C)p(x \mid C)}{p(x)}$$

  - $P(C)$ ist die **a-priori** Wahrscheinlichkeit.
  - $p(x \mid C)$, der **Klassen-Likelihood**, ist die Wahrscheinlichkeit, dass ein zu C gehörendes Ereignis den Beobachtungswert x hat.
  - $p(x)$ ist die **Evidenz**, die Randwahrscheinlichkeit, dass die Beobachtung x gemacht wird (nicht direkt berechenbar).

5.1.1 Summenregel (Wahrscheinlichkeit)



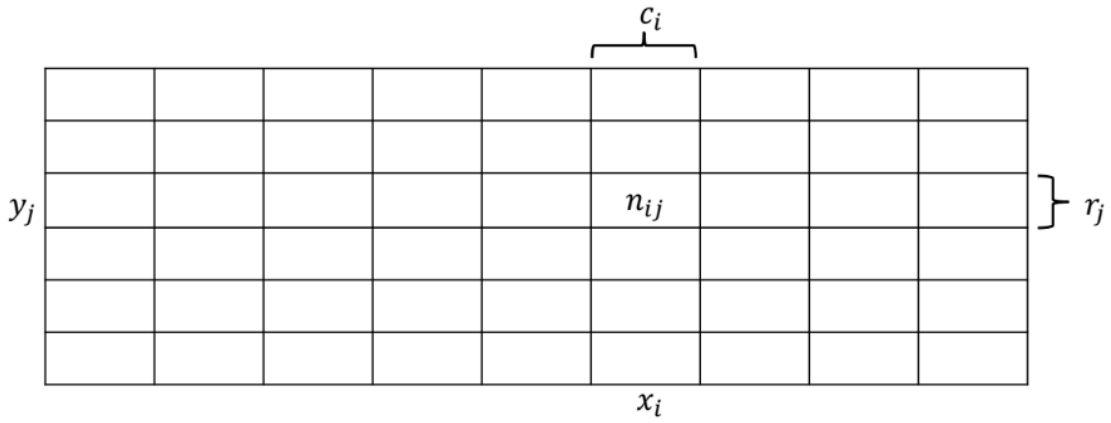
- Angenommen $p(X = x_i, Y = y_j) = \frac{n_{ij}}{N}$ ist bekannt.
- Es gilt

$$\begin{aligned} p(X = x_i) &= \frac{c_i}{N} \\ &= \sum_j \frac{n_{ij}}{N} \end{aligned}$$

und damit

$$\begin{aligned} p(X = x_i) &= \sum_j \frac{n_{ij}}{N} \\ &= \sum_j p(X = x_i, Y = y_j) \end{aligned}$$

5.1.2 Produktregel (Wahrscheinlichkeit)



- Tatsächlich ist bekannt: $p(Y = y_j \mid X = x_i) = \frac{n_{ij}}{c_i}$.
- Ferner ist bekannt: $p(X = x_i) = \frac{c_i}{N}$.
- Daraus ergibt sich

$$\begin{aligned} p(X = x_i, Y = y_j) &= \frac{n_{ij}}{N} \\ &= \frac{n_{ij}}{c_i} \cdot \frac{c_i}{N} \end{aligned}$$

  und somit

$$p(X = x_i, Y = y_j) = p(Y = y_j \mid X = x_i) p(X = x_i)$$

- $P(C)$ und $p(x \mid C)$ können basierend auf den Daten oder einer Stichprobe davon berechnet werden.
- $p(x) = p(x \mid C = 1)P(C = 1) + p(x \mid C = 0)P(C = 0)$ im Fall eines binären Klassifikationsproblems
- Im allgemeinen Fall gibt es k Klassen:

$$P(C_i \mid x) = \frac{P(C_i)p(x \mid C_i)}{\sum_k P(C_k)p(x \mid C_k)}$$

- Klasse k wird gewählt, falls $k = \arg\max_i P(C_i \mid x)$

5.1.3 Univariater Fall

- Die Dichten der Verteilungen $P(C_i)$ und $p(x \mid C_i)$ müssen für alle i geschätzt werden.
- Es kann eine (bis auf die Parameter) bekannte Verteilung vorliegen.
  - Es gibt Tests, um auf eine bestimmte Verteilung hin zu testen.
  - Es reichen jedoch auch Histrogramme und qq-Plots.
  - Die Berechnung der unbekannten Parameter erfolgt durch Optimierung (Maximum Likelihood).
- Die Verteilung kann sich aus mehreren bekannten Dichten zusammensetzen (z.B. Mixture of Gaussians).
- Wenn die Dichte nicht bekannt ist, so kann auf ein k-NN oder Kernel Verfahren zurückgegriffen werden.

5.1.4 Schätzung der a-priori Wahrscheinlichkeiten

- Die a-priori Wahrscheinlichkeiten werden aus dem Datensatz geschätzt mit

  $$p(C_k) = \frac{N_k}{N}$$

  wobei N_k die Anzahl der Instanzen mit der Klassenzugehörigkeit k ist und N die Anzahl der Daten im Datensatz.

5.1.5 Dichteschätzer

- Gegeben sind unabhängige und identisch verteilte Stichproben:

  $$X = \{x_{i1}\}_{i=1}^{N} = \{x_i\}_{i=1}^{N}$$

- Die x_i sind nach einer bis auf θ bekannten Dichte $p(x \mid \theta)$ gezogen worden.
- Gefunden werden soll das θ, bei dem die x_i am wahrscheinlichsten aus $p(x \mid \theta)$ gezogen wurden.
- Aufgrund der iid Annahme ergibt sich die Likelihood:

  $$\begin{aligned} l(\theta \mid X) &\equiv p(X \mid \theta) \\ &= \sum_{i=1}^{N} p(x_i \mid \theta) \end{aligned}$$

- Ziehen des Logarithmus (log-Likelihood) und Ableiten ermöglicht nun das Maximieren.

Gauss-Verteilung

- $p(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}$
- Die Maximum Likelihood (ML) Schätzer sind

$$\hat{m} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i}{N}$$
$$\hat{s}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} (x_i - \hat{m})^2}{N}$$

Bernoulli-Verteilung und deren Verallgemeinerung

- $P(x \mid p) = p^x(1-p)^{1-x}, x \in \{0, 1\}$
- Der ML Schätzer ist $\hat{p} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i}{N}$
- Verallgemeinert auf k Zustände erhält man ($\sum_{j=1}^{k} p_j = 1$)

$$P(x_{i1}, \ldots, x_{ik} \mid p) = \prod_{j=1}^{k} p_j^{x_{ij}}$$

und als ML Schätzer

$$\hat{p} = \frac{\sum_{i=1}^{N} x_{ij}}{N}$$

Binomialverteilung

- Verwandt mit dem Bernoulli Experiment
- m ist die Anzahl der Beobachtungen mit $x = 1$ für ein Bernoulli Experiment (bzw. die zugehörige Variable)
- $Bin(m \mid N, p) = \binom{N}{m} p^m (1-p)^{N-m}$
- $E(m) = Np$
- $Var(m) = Np(1-p)$

5.1.6 Verteilungen

- Setzt sich eine Verteilung aus n Verteilungen (z.B. Normalverteilungen) zusammen, so gilt:

$$p(x) = \sum_{j=1}^{n} \pi_j \mathcal{N}(x \mid \mu_j, \sigma_j)$$

- $\sum_{j=1}^{n} \pi_j = 1$

- Nun sollen die Parameter $\mu_j, \sigma_j, \pi_j, (1 \leq j \leq n)$ aus den Daten geschätzt werden.
- Mit der log-Likelihood Methode ergibt sich:

$$\sum_{i=1}^{N} \log \sum_{j=1}^{n} \pi_j \mathcal{N}(x_i \mid \mu_j, \sigma_j) \to \max$$

6 Clustering

7 Warenkorbanalyse

8 Analyse von Graphdaten