

Fachbereich Mathematik

Masterarbeit

Analyse der Konvergenzgeschwindigkeit eines einfach berechenbaren Neuronale-Netze-Regressionsschätzers

Adrian Gabel

XX.03.2020

Betreuer: Prof. Dr. Michael Kohler

Erklärung zur Abschlussarbeit gemäß § 22 Abs. 7 und § 23 Abs. 7 APB TU Darmstadt

Hiermit versichere ich, Adrian Gabel, die vorliegende Master-Thesis gemäß § 22 Abs. 7 APB der TU Darmstadt ohne Hilfe Dritter und nur mit den angegebenen Quellen und Hilfsmitteln angefertigt zu haben. Alle Stellen, die Quellen entnommen wurden, sind als solche kenntlich gemacht worden. Diese Arbeit hat in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegen.

Mir ist bekannt, dass im Falle eines Plagiats (§ 38 Abs. 2 APB) ein Täuschungsversuch vorliegt, der dazu führt, dass die Arbeit mit 5,0 bewertet und damit ein Prüfungsversuch verbraucht wird. Abschlussarbeiten dürfen nur einmal wiederholt werden.

Bei der abgegebenen Thesis stimmen die schriftliche und die zur Archivierung eingereichte elektronische Fassung gemäß § 23 Abs. 7 APB überein.

Darmstadt, 22.02.2020

Adrian Gabel

Inhaltsverzeichnis

Ŀı	nieitu	ing	0			
1	Grundlagen und Hilfsresultate					
	1.1	Definitionen	8			
	1.2	Hilfsresultate	11			
2	Kon	struktion des Neuronale Netze Schätzers	21			
	2.1	Definition der Netzwerkarchitektur	22			
	2.2	Definition der Gewichte der Ausgabeschicht	28			
3	Resi	ultat zur Konvergenzgeschwindigkeit	30			
4	Anwendungsbeispiel auf simulierte Daten					
Li	teratı	ırverzeichnis	44			
Aı	ppend	ix	45			

Einleitung

Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet. Lorem ipsum dolor sit amet, consetetur sadipscing elitr, sed diam nonumy eirmod tempor invidunt ut labore et dolore magna aliquyam erat, sed diam voluptua. At vero eos et accusam et justo duo dolores et ea rebum. Stet clita kasd gubergren, no sea takimata sanctus est Lorem ipsum dolor sit amet.

Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis at vero eros et accumsan et iusto odio dignissim qui blandit praesent luptatum zzril delenit augue duis dolore te feugait nulla facilisi. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit, sed diam nonummy nibh euismod tincidunt ut laoreet dolore magna aliquam erat volutpat.

Ut wisi enim ad minim veniam, quis nostrud exerci tation ullamcorper suscipit lobortis nisl ut aliquip ex ea commodo consequat. Duis autem vel eum iriure dolor in hendrerit in vulputate velit esse molestie consequat, vel illum dolore eu feugiat nulla facilisis at vero eros et accumsan et iusto odio dignissim qui blandit praesent luptatum zzril delenit augue duis dolore te feugait nulla facilisi.

Nam liber tempor cum soluta nobis eleifend option congue nihil imperdiet doming id quod mazim placerat facer. Diese Arbeit orientiert sich an [EKT⁺07] und [Koh10].

Kapitel 1

Grundlagen und Hilfsresultate

Der Zweck dieses Kapitels ist es, grundlegende Definitionen zu sammeln, die in den folgenden Kapiteln verwendet werden. Weiterhin werden wir Hilfsresultate darstellen und beweisen, welche wir für das Resultat der Konvergenzgeschwindigkeit des einfach berechenbaren Neuronale-Netze-Regressionsschätzer benötigen werden.

In dieser Arbeit behandeln wir Neuronale-Netze-Regressionsschätzer im Kontext der nichtparametrischen Regression mit zufälligem Design.

Im Gegensatz zur parametrischen Regression ist bei der nichtparametrischen die Bauart der zu schätzenden Funktion komplett unbekannt, was den Vorteil besitzt, dass weniger Annahmen getroffen werden müssen, man aber dadurch noch mehr Daten benötigt, um eine Funktion zu schätzen.

Bei der nichtparametrischen Regressionsschätzung seien $(X,Y),(X_1,Y_1),(X_2,Y_2),\ldots$ unabhängig identisch verteilte (u.i.v.) $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ -wertige Zufallsvariablen mit $\mathbb{E}[Y^2] < \infty$. Zudem sei $m \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ definiert durch $m(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$ die zugehörige Regressionsfunktion. Ausgehend von der Stichprobe

$$(X_1,Y_1),\ldots,(X_n,Y_n)$$

soll m geschätzt werden.

Das Problem der Regressionsschätzung bei zufälligem Design lässt sich wie folgt erläutern: In Anwendungsfällen ist üblicherweise die Verteilung von (X,Y) unbekannt, daher kann $m(x) = \mathbb{E}\left[Y \mid X = x\right]$ nicht berechnet werden. Oft ist es aber möglich, Werte von (X,Y) zu beobachten. Ziel ist es dann, daraus die Regressionsfunktion m zu schätzen. Im Hinblick auf die Minimierung des L_2 -Risikos sollte dabei der L_2 -Fehler der Schätzfunktion möglichst klein sein.

Für das L_2 -Risiko einer beliebigen messbaren Funktion $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ gilt:

$$\mathbb{E}[|f(X) - Y|^2] = \mathbb{E}[|m(X) - Y|^2] + \int_{\mathbb{R}^d} |f(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx),$$

d.h. der mittlere quadratische Vorhersagefehler einer Funktion ist darstellbar als Summe des L_2 -Risikos der Regressionsfunktion (unvermeidbarer Fehler) und des L_2 -Fehlers der entsteht aufgrund der Verwendung von f an Stelle von m bei der Vorhersage bzw. Approximation des Wertes von Y.

Formal führt das daher auf folgende Problemstellung: $(X,Y),(X_1,Y_1),(X_2,Y_2),...$ seien u.i.v. $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ wertige Zufallsvariablen mit $\mathbb{E}[Y^2] < \infty$ und $m \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ definiert durch $m(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$ sei die zugehörige Regressionsfunktion. Gegeben sei die Datenmenge

$$\mathscr{D}_n = \{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)\}.$$

Gesucht ist eine Schätzung

$$m_n(\cdot) = m_n(\cdot, \mathscr{D}_n) \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$$

von m, für die der L_2 -Fehler

$$\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx)$$

möglichst "klein" ist. (Referenz Györfi (2002))

1.1 Definitionen

Es ist bekannt, dass man Glattheitsvoraussetzungen an die Regressionsfunktion haben muss, um nichttriviale Konvergenzresultate für nichtparametrische Regressionsschätzer herzuleiten. Dafür verwenden wir die folgende Definition.

Definition 1.1 ((p,C)-Glattheit). Sei p=q+s mit $q\in\mathbb{N}_0$ und $s\in(0,1]$ (also $p\in(0,\infty)$ und sei C>0. Eine Funktion $f\colon\mathbb{R}^d\to\mathbb{R}$ heißt (p,C)-glatt, falls für alle $\alpha=(\alpha_1,\ldots,\alpha_d)\in\mathbb{N}_0^d$ mit $\sum_{i=1}^d\alpha_i=q$ die partielle Ableitung

$$\frac{\partial^q f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}$$

existiert und falls für alle $x, z \in \mathbb{R}^d$ die Abschätzung

$$\left| \frac{\partial^q f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}(x) - \frac{\partial^q f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_d^{\alpha_d}}(z) \right| \le C \cdot ||x - z||^r,$$

gilt, wobei $\|\cdot\|$ die euklidische Norm ist.

Bemerkung 1.2. Im Falle von $p \le 1$ ist eine Funktion genau dann (p, C)-glatt, wenn sie hölderstetig ist mit Exponent p und Hölderkonstante C.

1.1. DEFINITIONEN 9

Da wir uns in dieser Arbeit mit neuronalen Netzen beschäftigen, ist es hilfreich zu wissen was man darunter versteht. Ein neuronales Netz ist nichts anderes als eine Ansammlung von Neuronen, welche als Informationsverarbeitungseinheiten dienen, die schichtweise in einer Netzarchitektur angeordnet sind. Beginnend mit der Eingabeschicht (Input Layer) fließen Informationen über eine oder mehrere verborgene Schichten (Hidden Layer) bis hin zur Ausgabeschicht (Output Layer). Die Informationsweitergabe der Neuronen verläuft so, dass sie die Eingaben x_1, \dots, x_n , die einerseits aus dem beobachteten Prozess resultieren können, dessen Werte dem Neuron übergeben werden, oder wiederum aus den Ausgaben anderer Neuronen stammen, verarbeiten und entsprechend über seine Aktivierung reagieren. Dazu werden für ein künstliches Neuron j die Eingaben mit w_{1_i}, \dots, w_{n_i} gewichtet an eine Aktivierungsfunktion σ übergeben, welche die Neuronenaktivierung berechnet. Der Endpunkt des Informationsflusses in einem neuronalen Netz ist die Ausgabeschicht, die hinter den verborgenen Schichten liegt. Sie bildet damit die letzte Schicht in einem neuronalen Netz. Die Ausgabeschicht enthält somit das Ergebnis der Informationsverarbeitung durch das Netz. Zwei wichtige Charakteristika, die neuronale Netze aufweisen können, sind:

- Wenn in einem neuronalen Netz die Information von der Eingabesicht über die verborgenen Schichten bis hin zur Ausgabeschicht in eine Richtung ("vorwärts") weitergereicht wird, spricht man von einem feedforward neuronalen Netz.
- Ein neuronales Netz wird als ein "vollständig verbundenes" (*fully connected*) neuronales Netz bezeichnet, wenn sämtliche Neuronen einer Schicht mit allen der darauffolgenden verbunden sind. Jedes Neuron der verborgenen Schicht ist also mit allen Neuronen der Eingabeschicht verbunden und ebenso ist jedes Neuron der Ausgabeschicht mit allen der (letzten) verborgenen Schicht verbunden.

Da wir uns in dieser Arbeit mit neuronalen Netzen zur Regressionsschätzung beschäftigen und Funktionswerte schätzen wollen, betrachten wir nur neuronale Netze die in der Ausgabeschicht ein einzelnes Neuron besitzen.

Abbildung 1.1 zeigt schematisch ein mehrschichtiges fully connected feedforward neuronales Netz, welches aus einer Eingabeschicht (*Input feature 1 - Input feature n*_{in}), n_{lyr} verborgenen Schichten und einer Ausgabeschicht (*Output 1 - Output n*_{out}) besteht.

Der Ausgangspunkt für die Definition eines neuronalen Netzes ist die Wahl einer Aktivierungsfunktion $\sigma \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Wir haben uns in dieser Arbeit für die sogenannten *squashing functions* entschieden, welche eine monoton wachsend Funktion ist, für die

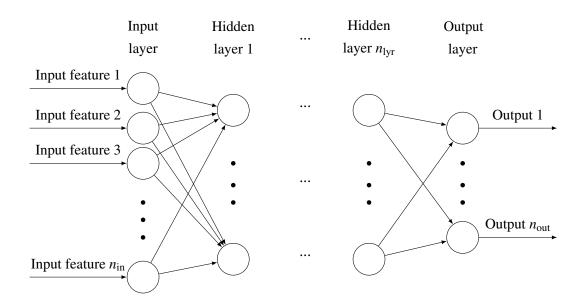


Abbildung 1.1: Fully connected feedforward neuronales Netz mit einer Eingabeschicht mit $n_{\rm in}$ Neuronen, $n_{\rm lyr}$ vielen verborgenen Schichten dessen Anzahl an Neuronen variieren kann und einer Ausgabeschicht bestehend aus $n_{\rm out}$ Neuronen.

 $\lim_{x\to-\infty} \sigma(x) = 0$ und $\lim_{x\to\infty} \sigma(x) = 1$ gilt. Ein Beispiel für eine squashing function ist der sogenannte sigmoidal bzw. logistische squasher

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (x \in \mathbb{R}). \tag{1.1}$$

Definition 1.3. Sei $N \in \mathbb{N}_0$. Eine Funktion $\sigma \colon \mathbb{R} \to [0,1]$ wird N-zulässig genannt, wenn sie monoton wachsend und lipschitzsteig [For16] ist und wenn zusätzlich die folgenden drei Bedingungen erfüllt sind:

- (i) Die Funktion σ ist N+1 mal stetig differenzierbar mit beschränkten Ableitungen.
- (ii) Es existiert ein Punkt $t_{\sigma} \in \mathbb{R}$, in welchem alle Ableitungen bis hin zur N-ten Ableitung von σ ungleich Null sind.
- (iii) Wenn y > 0 ist, gilt $|\sigma(y) 1| \le \frac{1}{y}$. Wenn y < 0 ist, gilt $|\sigma(y)| \le \frac{1}{|y|}$.

In Lemma 1.4 werden wir zudem zeigen, dass der logistische squasher (1.1) N-zulässig ist für beliebiges $N \in \mathbb{N}$.

11

1.2 Hilfsresultate

Lemma 1.4. Sei $N \in \mathbb{N}_0$ beliebig, dann erfüllt der logistische squasher $\sigma \colon \mathbb{R} \to [0,1], \sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ die Bedingungen aus Definition 1.3.

Beweis. Sei $N \in \mathbb{N}_0$ beliebig. Wir wissen, dass σ monoton wachsend ist, da für beliebige $s,t \in \mathbb{R}$ mit $s \le t$ gilt:

$$\sigma(s) = \frac{1}{1 + \exp(-s)} \le \frac{1}{1 + \exp(-t)} = \sigma(t),$$

wobei wir bei der Ungleichung die Monotonie der Exponentialfunktion verwendet haben und die obige Ungleichung aus

$$\exp(s) \le \exp(t)$$

$$\Leftrightarrow \exp(-s) \ge \exp(-t)$$

$$\Leftrightarrow 1 + \exp(-s) \ge 1 + \exp(-t)$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{1 + \exp(-s)} \le \frac{1}{1 + \exp(-t)}$$

folgt. Zudem ist σ als Komposition glatter Funktionen, N+1 mal stetig differenzierbar ist. Die Ableitungen von σ haben die Form:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x}(x) = -\frac{1}{(1 + \exp(-x))^2} \cdot (-\exp(-x))$$

$$= \frac{\exp(-x)}{1 + \exp(-x)} \cdot \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

$$= \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(-x)}\right) \cdot \frac{1}{1 + \exp(-x)}$$

$$= (1 - \sigma(x)) \cdot \sigma(x).$$

Da wir bei weiterem Ableiten die Produktregel wiederholt anwenden sind alle Ableitungen von σ , Polynome in σ . Dadurch folgt Bedingung (i) aus Definition 1.3, da σ nach Voraussetzung durch 0 und 1 beschränkt ist, und die Ableitungen von σ als Produkt von beschränkten Faktoren daher auch. Da hiermit auch die erste Ableitung von σ beschränkt ist wissen wir nach Satz ... aus (REFERENZ), dass σ lipschitzstetig ist.

Nun kommen wir zum Beweis von Bedingung (ii). Polynome, die nicht das 0-Polynom sind, haben nach Satz ... (REFERENZ) auf (0,1) endlich viele Nullstellen und σ bildet nach Voraussetzung in das Intervall $[0,1] \supseteq (0,1)$ ab. Da die Ableitungen von σ , als Zusammensetzung von Polynomen in σ , wieder Polynome sind für die die obere Eigenschaft ebenfalls gilt, existiert ein $t_{\sigma} \in \mathbb{R}$ mit $\sigma(t_{\sigma}) \neq 0$, sodass alle Ableitungen bis zum Grad N von σ , aufgrund ihrer Struktur ungleich 0 sind. Daher ist Bedingung (ii) ebenfalls erfüllt.

Wir wissen, dass für $x \in R$ und damit insbesondere für ein beliebiges x > 0:

$$x \le \exp(x) + 1$$

gilt. Daraus erhalten wir mit Umformungen da x > 0 und $1 + \exp(-x) > 0$ ist:

$$x \le \exp(x) + 1$$

$$\Leftrightarrow x \cdot \exp(-x) \le 1 + \exp(-x)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\exp(-x)}{1 + \exp(-x)} \le \frac{1}{x}$$

$$\Leftrightarrow 1 - \frac{1}{1 + \exp(-x)} \le \frac{1}{x}$$

$$\Leftrightarrow |\sigma(x) - 1| \le \frac{1}{x}.$$

Wobei die letzte Ungleichung aus der Eigenschaft des Betrags kommt, da $\frac{1}{1+\exp(-x)}-1<0$ ist, weil $1+\exp(-x)>1$, da $\exp(-x)>0$. Dies zeigt die erste Relation aus Bedingung (iii). Die zweite Relation folgt durch die gleiche Art und Weise, da wir durch

$$\frac{1}{1 + \exp(x)} - \frac{1}{2} = \sigma(0 - x) - \frac{1}{2} = -\sigma(0 + x) + \frac{1}{2} = -\frac{1}{1 + \exp(-x)} + \frac{1}{2}$$

wissen, dass σ punktsymmetrisch in $(0,\frac{1}{2})$ ist. Die obige Gleichheit folgt aus

$$\frac{1}{1 + \exp(x)} - \frac{1}{2} = -\frac{1}{1 + \exp(-x)} + \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{1 + \exp(x)} - \frac{1}{2} + \frac{1}{1 + \exp(-x)} = \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1 + \exp(-x) + 1 + \exp(x)}{(1 + \exp(x)) \cdot (1 + \exp(-x))} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow \frac{2 + \exp(-x) + \exp(x)}{2 + \exp(-x) + \exp(x)} - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$$

$$\Leftrightarrow 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}.$$

Aus dieser Eigenschaft folgt mit

$$\sigma(-x) - 1 = \frac{1}{1 + \exp(x)} - 1 = -\frac{1}{1 + \exp(-x)} = -\sigma(x)$$

für x < 0 aus der ersten Relation, da -x > 0 ist:

$$|\sigma(x)| = |-\sigma(x)| = |\sigma(-x) - 1| \le \frac{1}{-x} = \frac{1}{|x|}.$$

Damit haben wir alle drei Bedingungen aus Definition 1.3 gezeigt und unsere Aussage bewiesen.

13

Lemma 1.5 (Langrangesche Form des Restglieds [For16]). Sei $f: I \to \mathbb{R}$ eine (N+1)-mal stetig differenzierbare Funktion und $u, x \in I$. Dann existiert ein $\xi \in [u, x]$, so dass

$$f(x) = \sum_{k=0}^{N} \frac{f^{(k)}(u)}{k!} (x - u)^k + \frac{f^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} (x - u)^{N+1}.$$

Lemma 1.6. *Sei* σ : $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *eine Funktion und* R, a > 0.

a) Angenommen σ ist zwei mal stetig differenzierbar und $t_{\sigma,id} \in \mathbb{R}$ so, dass $\sigma'(t_{\sigma,id}) \neq 0$ ist. Dann gilt mit

$$f_{\mathrm{id}}(x) = \frac{R}{\sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})} \cdot \left(\sigma\left(\frac{x}{R} + t_{\sigma,\mathrm{id}}\right) - \sigma(t_{\sigma,\mathrm{id}})\right)$$

für beliebige $x \in [-a, a]$:

$$|f_{\mathrm{id}}(x) - x| \le \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a^2}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})|} \cdot \frac{1}{R}.$$

b) Angenommen σ ist drei mal stetig differenzierbar und $t_{\sigma,sq} \in \mathbb{R}$ so, dass $\sigma''(t_{\sigma,sq}) \neq 0$ ist. Dann gilt mit

$$f_{\text{sq}}(x) = \frac{R^2}{\sigma''(t_{\sigma,\text{sq}})} \cdot \left(\sigma\left(\frac{2 \cdot x}{R} + t_{\sigma,\text{sq}}\right) - 2 \cdot \sigma\left(\frac{x}{R} + t_{\sigma,\text{sq}}\right) + \sigma(t_{\sigma,\text{sq}})\right)$$

für beliebige $x \in [-a,a]$:

$$|f_{\mathrm{sq}}(x) - x^2| \le \frac{5 \cdot \|\sigma'''\|_{\infty} \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma,\mathrm{sq}})|} \cdot \frac{1}{R}.$$

Beweis. a) Wir wissen, dass f_{id} 2-mal differenzierbar ist, da nach Vorraussetzung σ 2-mal stetig differenzierbar ist. Damit folgt mit Lemma 1.5 für $f = f_{id}, N = 1$ und I = [-a, a], dass ein $\xi \in [0, x]$ existiert, so dass:

$$f_{id}(x) = \sum_{k=0}^{N} \frac{f_{id}^{(k)}(0)}{k!} x^{k} + \frac{f_{id}^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} x^{N+1}.$$

Mit $f_{id}(0) = 0$ und $f'_{id}(0) = 1$ erhalten wir:

$$\begin{aligned} |f_{\mathrm{id}}(x) - x| &= \left| 0 + 1 \cdot x + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{R \cdot \sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})} \sigma''(\frac{\xi}{R} + t_{\sigma,\mathrm{id}}) \cdot x^2 - x \right| \\ &= \left| \frac{\sigma''(\frac{\xi}{R} + t_{\sigma,\mathrm{id}}) \cdot x^2}{2R \cdot \sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})} + x - x \right| \\ &\leq \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a^2}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})|} \cdot \frac{1}{R}, \end{aligned}$$

Wobei sich die letzte Ungleichung aus den Eigenschaften der Supremumsnorm ergibt und zudem aus $x \in [-a,a] \Leftrightarrow -a \leq x \leq a$ durch Quadrieren der Ungleichung folgt, dass $x^2 \leq a^2$ ist.

b) Die Funktion f_{sq} die hier nun 3-mal differenzierbar ist, da σ nach Voraussetzung 3-mal stetig differenzierbar ist. Es wie in a) durch Lemma 1.5 mit $f = f_{sq}, N = 2$ und I = [-a, a], dass ein $\xi \in [0, x]$ existiert, so dass:

$$f_{\text{sq}}(x) = \sum_{k=0}^{N} \frac{f_{\text{sq}}^{(k)}(0)}{k!} x^{k} + \frac{f_{\text{sq}}^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} x^{N+1}.$$

Mit $f_{sq}(0) = 0$, $f'_{sq}(0) = 0$ und $f''_{sq}(0) = 2$ erhalten wir:

$$\begin{split} |f_{sq}(x) - x^{2}| &= \left| x^{2} + \frac{1}{6} \cdot \frac{R^{2}}{\sigma''(t_{\sigma,sq})} \left(\frac{8}{R^{3}} \sigma'''(\frac{2\xi}{R} + t_{\sigma,sq}) - \frac{2}{R^{3}} \sigma'''(\frac{\xi}{R} + t_{\sigma,sq}) \right) \cdot x^{3} - x^{2} \right| \\ &\leq \frac{a^{3}}{6 \cdot |\sigma''(t_{\sigma,sq})|} \cdot \frac{1}{R} \cdot \left(8 \cdot |\sigma'''(\frac{2\xi}{R} + t_{\sigma,sq})| + 2|\sigma'''(\frac{\xi}{R} + t_{\sigma,sq})| \right) \\ &\leq \frac{10 \cdot a^{3}}{6 \cdot |\sigma''(t_{\sigma,sq})|} \cdot \frac{1}{R} \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \\ &= \frac{5 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^{3}}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma,sq})|} \cdot \frac{1}{R}. \end{split}$$

Lemma 1.7. Sei $\sigma: \mathbb{R} \to [0,1]$ 2-zulässig. Zudem sei R > 0 und a > 0 beliebig. Dann gilt für das neuronale Netz

$$f_{\text{mult}}(x,y) = \frac{R^2}{4 \cdot \sigma''(t_{\sigma})} \cdot \left(\sigma\left(\frac{2 \cdot (x+y)}{R} + t_{\sigma}\right) - 2 \cdot \sigma\left(\frac{x+y}{R} + t_{\sigma}\right) - \sigma\left(\frac{2 \cdot (x-y)}{R} + t_{\sigma}\right) + 2 \cdot \sigma\left(\frac{x-y}{R} + t_{\sigma}\right)\right)$$

für beliebige $x, y \in [-a, a]$ die folgende Ungleichung:

$$|f_{\text{mult}}(x,y) - x \cdot y| \le \frac{20 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R}.$$

Beweis. Durch Einsetzen erhalten wir

$$f_{\text{mult}}(x,y) = \frac{1}{4}(f_{\text{sq}}(x+y) - f_{\text{sq}}(x-y))$$

und

$$x \cdot y = \frac{1}{4} ((x+y)^2 - (x-y)^2).$$

15

Aus diesen beiden Gleichungen folgt durch Ausklammern von $\frac{1}{4}$, der Homogenität des Betrags und der Anwendung der Dreiecksungleichung:

$$|f_{\text{mult}}(x,y) - x \cdot y| = \frac{1}{4} \cdot |f_{\text{sq}}(x+y) - f_{\text{sq}}(x-y) - (x+y)^{2} + (x-y)^{2}|$$

$$\leq \frac{1}{4} \cdot |f_{\text{sq}}(x+y) - (x+y)^{2}| + \frac{1}{4} \cdot |(x-y)^{2} - f_{\text{sq}}(x-y)|$$

$$\leq 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{40 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^{3}}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R}$$

$$= \frac{20 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^{3}}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R},$$

wobei wir bei der letzten Ungleichung verwendet haben, dass a>0 nach Lemma 1.6b) beliebig gewählt wurde und daher insbesondere für beliebiges $x\in[-2a,2a]$

$$|f_{\text{sq}}(x) - x^2| \le \frac{40 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R}$$

gilt. \Box

Lemma 1.8. Sei $\sigma: \mathbb{R} \to [0,1]$ 2-zulässig. Sei f_{mult} das neuronale Netz aus Lemma 1.7 und f_{id} das neuronale Netz aus Lemma 1.6. Angenommen es gelten die Ungleichungen

$$a \ge 1$$
 und $R \ge \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|}.$ (1.2)

Dann erfüllt das neuronale Netz

$$f_{\text{ReLU}}(x) = f_{\text{mult}}(f_{\text{id}}(x), \sigma(R \cdot x))$$
 (1.3)

für alle $x \in [-a,a]$ *folgende Ungleichung:*

$$|f_{\text{ReLU}}(x) - \max\{x, 0\}| \le 56 \cdot \frac{\max\{|\sigma''|_{\infty}, \|\sigma'''|_{\infty}, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma}), |\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}} \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R}.$$

Beweis. Da σ nach Voraussetzung 2-zulässig nach Definition 1 ist, gilt für $R \ge 0$, und $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$:

$$|\sigma(R \cdot x) - 1| \le \frac{1}{R \cdot x}$$
 für $x > 0$

und

$$|\sigma(R \cdot x)| \le \frac{1}{|R \cdot x|}$$
 für $x < 0$.

Damit folgt aus der Homogenität des Betrags für alle $x \neq 0$:

$$|\sigma(R \cdot x) - \mathbb{1}_{[0,\infty)}(x)| \le \frac{1}{|R \cdot x|} = \frac{1}{R \cdot |x|}.$$
 (1.4)

Nach Lemma 1.6 und Lemma 1.7 gilt:

$$|f_{\mathrm{id}}(x) - x| \le \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a^2}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,\mathrm{id}})|} \cdot \frac{1}{R} \text{ für } x \in [-a, a]$$

$$\tag{1.5}$$

und

$$|f_{\text{mult}}(x,y) - x \cdot y| \le \frac{160 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R} \text{ für } x, y \in [-2a, 2a].$$
 (1.6)

Da nach Voraussetzung $a \ge 1$ ist, gilt insbesondere $[0,1] \subseteq [-2a,2a]$ und daher gilt insbesondere $\sigma(Rx) \in [0,1] \subseteq [-2a,2a]$. Zudem erhalten wir durch eine Nulladdition, das Anwenden der Dreiecksungleichung, die Verwendung von Lemma 1.6 und (1.2) für R:

$$|f_{id}(x)| = |f_{id}(x) - x + x|$$

$$\leq |f_{id}(x) - x| + |x|$$

$$\frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a^2}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R} + |x|$$

$$\frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a^2}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|} \cdot \frac{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|}{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a} + |x|$$

$$= a + |x|$$

$$\leq 2 \cdot a$$

wobei $x \in [-a,a]$. Daraus folgt insbesondere $f_{id}(x) \in [-2a,2a]$. Mithilfe von $\max\{x,0\} = x \cdot \mathbbm{1}_{[0,\infty)}(x)$, (1.3, zweier Nulladditionen und dem zweifachen Anwenden der Dreiecksungleichung erhalten wir:

$$\begin{split} |f_{\text{ReLU}}(x) - \max\{x, 0\}| \\ &= |f_{\text{mult}}(f_{\text{id}}(x), \sigma(R \cdot x)) - x \cdot \mathbb{1}_{[0, \infty)}(x)| \\ &\leq |f_{\text{mult}}(f_{\text{id}}(x), \sigma(R \cdot x)) - f_{\text{id}}(x) \cdot \sigma(R \cdot x)| \\ &+ |f_{\text{id}}(x) \cdot \sigma(R \cdot x) - x \cdot \sigma(R \cdot x)| + |x \cdot \sigma(R \cdot x) - x \cdot \mathbb{1}_{[0, \infty)}(x)|. \\ &\text{Daraus ergibt sich mithilfe von } (1.4) - 1.6), \ \sigma(Rx) \in [0, 1] \ \text{und} \ a^3 \geq 1 \\ &\leq \frac{160 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R} + \frac{||\sigma''||_{\infty} \cdot a^3}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|} \cdot \frac{1}{R} \cdot 1 + \frac{1}{R} \\ &\leq \left(\frac{160}{3} \cdot \frac{||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3}{|\sigma''(t_{\sigma})|} + \frac{||\sigma''||_{\infty} \cdot a^3}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|} + \frac{a^3}{a^3}\right) \cdot \frac{1}{R} \\ &\leq \left(\frac{160 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3 + 3 \cdot ||\sigma'''||_{\infty} \cdot a^3 + 3 \cdot a^3}{3 \cdot \min\{2 \cdot \sigma'(t_{\sigma})|, |\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}}\right) \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R} \\ &\leq \frac{166}{3} \cdot \left(\frac{\max\{||\sigma'''||_{\infty}, ||\sigma'''(t_{\sigma})|, 1\}}{\min\{2 \cdot ||\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}} \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R}\right) \\ &\leq 56 \cdot \frac{\max\{|\sigma'''||_{\infty}, ||\sigma'''(t_{\sigma})|, 1\}}{\min\{2 \cdot ||\sigma''(t_{\sigma})|, ||\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}} \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R}. \end{split}$$

17

Lemma 1.9. Sei $M \in \mathbb{N}$ und sei $\sigma \colon \mathbb{R} \to [0,1]$ 2-zulässig. Sei a > 0 und

$$R \geq \frac{\|\sigma''\| \infty \cdot (M+1)}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma})|},$$

sei $y \in [-a,a]$ und f_{ReLU} das neuronale Netz aus Lemma 1.8. Dann erfüllt das neuronale Netz.

$$f_{\text{hat},y}(x) = f_{\text{ReLU}}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) + 1\right) - 2 \cdot f_{\text{ReLU}}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y)\right) + f_{\text{ReLU}}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) - 1\right)$$

für alle $x \in [-a,a]$ mit $z_+ = \max\{0,z\}$ $(z \in \mathbb{R})$:

$$\left| f_{\text{hat},y}(x) - \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - y| \right)_{\perp} \right| \leq 1792 \cdot \frac{\max\{|\sigma''|_{\infty}, \|\sigma'''|_{\infty}, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,\text{id}}), |\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}} \cdot M^3 \cdot \frac{1}{R}.$$

Beweis. Für $x \in \mathbb{R}$ gilt die Gleichung:

$$(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x|)_{+} = \max\{\frac{M}{2a} \cdot x + 1, 0\} - 2 \cdot \max\{\frac{M}{2a} \cdot x, 0\} + \max\{\frac{M}{2a} \cdot x - 1, 0\}, \quad (1.7)$$

die wir im zweiten Teil dieses Beweises zeigen werden. Damit beweisen wir das Resultat mit Hilfe von Lemma 1.8, denn mit der Definition von $f_{hat,y}(x)$ und zwei mal der Dreiecksungleichung folgt:

$$\left| f_{\text{hat},y}(x) - \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - y| \right)_{+} \right| \leq \left| f_{\text{ReLU}} \left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) + 1 \right) - \max \left\{ \frac{M}{2a} \cdot (x - y) + 1, 0 \right\} \right|$$

$$+ 2 \cdot \left| f_{\text{ReLU}} \left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) \right) - \max \left\{ \frac{M}{2a} \cdot (x - y), 0 \right\} \right|$$

$$+ \left| f_{\text{ReLU}} \left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) - 1 \right) - \max \left\{ \frac{M}{2a} \cdot (x - y) - 1, 0 \right\} \right|$$

$$\leq 1792 \cdot \frac{\max \left\{ |\sigma''|_{\infty}, ||\sigma'''|_{\infty}, 1 \right\}}{\min \left\{ 2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma}), |\sigma'''(t_{\sigma})|, 1 \right\}} \cdot M^{3} \cdot \frac{1}{R},$$

wobei die letzte Ungleichung daraus folgt, dass wir auf jeden Summanden mit $1 \le a =$ M+1 Lemma 1.8 angewendet haben und die Abschätzung

$$(M+1)^3 < (2M)^3 = 8M^3$$

verwendet haben, da $M \ge 1$ ist.

 (\Box)

Um Gleichung (1.7) zu zeigen unterscheiden wir vier Fälle.

Fall 1 (x < 0) In diesem Fall hat die linke Seite nach der Definition des Betrags die Gestalt

$$\max\{1+\frac{M}{2a}\cdot x,0\}$$

und die rechte Seite die Form

$$\max\{\frac{M}{2a} \cdot x + 1, 0\} - 2 \cdot 0 + 0,$$

da x < 0 und damit die letzten zwei Summanden 0 sind. Es erfordert hier eine weitere Fallunterscheidung.

Fall 1.1 $(0 > x \ge -\frac{2a}{M})$ In diesem Fall gilt für die linke und rechte Seite:

$$\max\{1 + \frac{M}{2a} \cdot x, 0\} = 1 + \frac{M}{2a} \cdot x.$$

Fall 1.2 $(x < -\frac{2a}{M})$ In diesem Fall sind beide Seiten gleich 0, da $1 + \frac{M}{2a} \cdot x \le 0$ ist. (\Box)

Fall 2 $(x \ge 0)$ In diesem Fall hat die linke Seite nach der Definition des Betrags die Gestalt

$$\max\{1 - \frac{M}{2a} \cdot x, 0\}$$

und die rechte Seite die Form

$$\max\{\frac{M}{2a} \cdot x + 1, 0\} - 2 \cdot \max\{\frac{M}{2a} \cdot x, 0\} + \max\{\frac{M}{2a} \cdot x - 1, 0\}$$

und erfordert daher eine weitere Fallunterscheidung.

Fall 2.1 $(0 \le x < \frac{2a}{M})$ In diesem Fall hat die linke Seite die Gestalt

$$1 - \frac{M}{2a} \cdot x$$

und die rechte Seite die Form

$$\frac{M}{2a} \cdot x + 1 - 2 \cdot \frac{M}{2a} \cdot x + 0 = 1 - \frac{M}{2a} \cdot x.$$

und stimmt daher mit der linken Seite überein.

Fall 2.2 $(x \ge \frac{2a}{M})$ In diesem ist die linke Seite gleich 0, da $1 - \frac{M}{2a} \cdot x < 0$ ist und die rechte Seite bestitz die Form

$$\frac{M}{2a} \cdot x + 1 - 2 \cdot \frac{M}{2a} \cdot x + \frac{M}{2a} \cdot x - 1 = 0.$$

Durch diese Fallunterscheidung wurde die Gleichung (1.7) bewiesen und damit ist der Beweis vollständig.

19

Die nächsten Lemmata benötigen wir für den Beweis unseres Hauptresultats, einer Aussage über die Konvergenzgeschwindigkeit unseres neuronale Netze Schätzers.. Diese Lemmata werden hier nur der Vollständigkeit halber und ohne Beweis aufgeführt.

Lemma 1.10 ([AB19], Lemma 5). *Sei M* $\in \mathbb{N}$ *und* $\sigma \colon \mathbb{R} \to [0,1]$ 2-zulässig nach Definition 1.3. (AUF SCHREIBWEISE VON FNET AUFPASSEN) Sei a > 1 und

$$R \ge \max \left\{ \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot (M+1)}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,id})|}, \frac{9 \cdot \|\sigma''\|_{\infty} \cdot a}{|\sigma'(t_{\sigma,id})|}, \frac{20 \cdot \|\sigma'''\|_{\infty}}{3 \cdot |\sigma''(t_{\sigma})|} \cdot 3^{3 \cdot 3^{s}} \cdot a^{3 \cdot 2^{s}}, 1792 \cdot \frac{\max\{\|\sigma''\|_{\infty}, \|\sigma'''\|_{\infty}, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,id})|, |\sigma''(t_{\sigma})|, 1\}} \cdot M^{3} \right\}$$

und sei $y \in [-a,a]^d$. Sei $N \in \mathbb{N}$ und $j_1, \ldots, j_d \in \mathbb{N}_0$ so, dass $j_1 + \cdots + j_d \leq N$ gilt und wir setzen $s = \lceil \log_2(N+d) \rceil$. Sei f_{id}, f_{mult} und $f_{hat,z}$ (für $z \in \mathbb{R}$) die neuronalen Netze wir in Lemma 1.6, Lemma 1.7 und Lemma 1.9. Wir definieren das Netz $f_{net,j_1,\ldots,j_d,y}$ durch:

$$f_{net,j_1,...,j_d,y}(x) = f_1^{(0)}(x).$$

wobei

$$f_k^{(l)}(x) = f_{\text{mult}}\left(f_{2k-1}^{(l+1)}(x), f_{2k}^{(l+1)}(x)\right)$$

für $1 \le k \le 2^l$ und $0 \le l \le s-1$ und

$$f_k^{(s)}(x) = f_{id}(f_{id}(x^{(l)} - y^{(l)}))$$

für $j_1 + j_2 + \dots + j_{l-1} + 1 \le k \le j_1 + j_2 + \dots + j_l$ und $1 \le l \le d$ und

$$f_{j_1+j_2+\dots+j_d+k}^{(s)}(x) = f_{\text{hat},\mathbf{y}^{(k)}}(x^{(k)})$$

 $f\ddot{u}r \ 1 \le k \le d \ und$

$$f_k^{(s)}(x) = 1$$

 $f \ddot{u} r j_1 + j_2 + \dots + j_d + d + 1 \le k \le 2^s$.

Dann erhalten wir für $x \in [-a,a]^d$:

$$\left| f_{net,y}(x) - (x^{(1)} - y^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - y^{(d)})^{j_d} \prod_{j=1}^d (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - y^{(j)}|)_+ \right|$$

$$\leq c_{12} \cdot 3^{3 \cdot 3^s} \cdot a^{3 \cdot 2^s} \cdot M^3 \cdot \frac{1}{R}.$$

Lemma 1.11 ([AB19], Lemma 8). Sei $\beta_n = c_6 \cdot \log(n)$ für eine hinreichend große Konstante $c_6 > 0$. Angenommen die Verteilung von (X,Y) erfüllt

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{e}^{c_4\cdot|Y|^2}\right)<\infty$$

für eine Konstante $c_4 > 0$ und dass der Betrag der Regressionsfunktion m beschränkt ist. Sei \mathscr{F}_n eine Menge von Funktionen $f: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ und wir nehmen an, dass der Schätzer m_n

$$m_n = T_{\beta_n} \tilde{m}_n$$

erfüllt, mit

$$\tilde{m}_n(\cdot) = \tilde{m}_n(\cdot, (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)) \in \mathscr{F}_n$$

und

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - \tilde{m}_n(X_i)|^2 \le \min_{l \in \Theta_n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - g_{n,l}(X_i)|^2 + pen_n(g_n, l) \right)$$

mit einer nichtleeren Parametermenge Θ_n , zufällige Funktionen $g_{n,l} \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ und deterministischen penalty Termen $pen_n(g_{n,l}) \geq 0$, wobei die zufälligen Funktionen $g_{n,l} \colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ nur von den Zufallsvariablen

$$\mathbf{b}_{1}^{(1)},\ldots,\mathbf{b}_{r}^{(1)},\ldots,\mathbf{b}_{1}^{(I_{n})},\ldots,\mathbf{b}_{r}^{(I_{n})}$$

abhängen, die unabhängig von $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots$ sind. Dann erfüllt m_n :

$$\begin{split} & \mathbb{E} \int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \\ & \leq \frac{c_{13} \cdot \log(n)^2 \cdot \left(\log\left(\sup_{x_1^n \in (supp(X))^n} \mathcal{N}_1\left(\frac{1}{n \cdot \beta_n}, \mathcal{F}_n, x_1^n\right)\right) + 1\right)}{n} \\ & + 2 \cdot \mathbb{E} \left(\min_{l \in \Theta_n} \int |g_{n,l}(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) + pen_n(g_{n,l})\right), \end{split}$$

für n > 1 und einer Konstante $c_{13} > 0$ welche nicht von n abhängt. (DEFINITION VON LP-e-ÜBERDECKUNGSZAHLEN)

Das nächste Lemma benötigen wir um eine Schranke für die Überdeckungszahl $\mathcal{N}_1\left(\frac{1}{n \cdot \beta_n}, \mathcal{F}_n, x_1^n\right)$ zu finden.

Lemma 1.12 ([AB19], Lemma 9). Sei a > 0 und $d, N, J_n \in \mathbb{N}$ so, dass $J_n \leq n^{c_{14}}$ und setze $\beta_n = c_6 \cdot \log(n)$. Sei σ 2-zulässig nach Definition 1.3. Sei \mathscr{F} die Menge aller Funktionen die durch (2.1) definiert sind mit $k_1 = k_2 = \cdots = k_L = 24 \cdot (N+d)$ und dass der Betrag der Gewichte durch $c_{15} \cdot n^{c_{16}}$ beschränkt ist. Sei

$$\mathscr{F}^{(J_n)} = \left\{ \sum_{j=1}^{J_n} a_j \cdot f_j : f_j \in \mathscr{F} \quad und \quad \sum_{j=1}^{J_n} a_j^2 \leq c_{17} \cdot n^{c_{18}} \right\}.$$

Dann gilt für n > 1:

$$\log \left(\sup_{x_1^n \in [-a,a]^{d \cdot n}} \mathcal{N}_1 \left(\frac{1}{n \cdot \beta_n}, \mathcal{F}^{(J_n)}, x_1^n \right) \right) \le c_{19} \cdot \log(n) \cdot J_n,$$

für eine Konstante c_{19} die nur von L, N, a und d abhängt.

Kapitel 2

Konstruktion des Neuronale Netze Schätzers

In diesem Kapitel werden wir mithilfe von unseren gegebenen Datenmenge

$$\mathscr{D}_n = \{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)\},\$$

unseren Regressionsschätzer konstruieren.

Die Netzwerkarchitektur (L,k) hängt von einer positiven ganzen Zahl L, die der Anzahl der verborgenen Schichten ist und einem Vektor $k=(k_1,\ldots,k_L)\in\mathbb{N}^L$, der mit jeder Kombonente die Anzahl der Neuronen in der jeweiligen verborgen Schichte angibt.

Ein mehrschichtiges feedforward neuronales Netz mit Architektur (L,k) und dem logistischen squasher (1.1) als Aktivierungsfunktion, ist eine reelwertige Funktion $f: \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ definiert durch:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{k_L} c_i^{(L)} \cdot f_i^{(L)}(x) + c_0^{(L)}$$

für $c_0^{(L)},\dots,c_{k_L}^{(L)}\in\mathbb{R}$ und für $f_i^{(L)}$ rekursiv definiert durch:

$$f_i^{(r)}(x) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{k_r - 1} c_{i,j}^{(r-1)} \cdot f_j^{(r-1)}(x) + c_{i,0}^{(r-1)}\right)$$

für $c_{i,0}^{(r-1)},\dots,c_{i,k_{r-1}}^{(r-1)}\in\mathbb{R}(r=2,\dots,L)$ und:

$$f_i^{(1)}(x) = \sigma \left(\sum_{j=1}^d c_{i,j}^{(0)} \cdot x^{(j)} + c_{i,0}^{(0)} \right)$$
(2.1)

für
$$c_{i,0}^{(0)}, \dots, c_{i,d}^{(0)} \in \mathbb{R}$$
.

Bei neuronale Netze Regressionsschätzer wählt man keine Aktivierungsfunktion mehr, da wir einen Funktionswert schätzen wollen nichts mit einer Wahrscheinlichkeit klassifizieren möchten. (REFERENZ)

Für die Konstruktion unseren Schätzers verwenden wir die gegebene Datenmenge \mathscr{D} und wählen die Gewichte des neuronalen Netzes so, dass die resultierende Funktion aus (2.1) eine gute Schätzungen für die Regressionsfunktion ist. Dafür wählen wir die Gewichte bis auf die in der Ausgabeschicht fest und schätzen die Gewichte in der Ausgabeschicht in dem wir mit unserer Datenmenge ein regularisiertes Kleinste-Quadrate-Problem (REFERENZ) lösen.

2.1 Definition der Netzwerkarchitektur

Sei a>0 fest. Die Wahl der Netzwerkarchitektur und der Werte aller Gewichte bis auf die aus der Ausgabeschicht ist durch folgendes Approximationsresultat durch eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen für (p,C)-glatte Funktionen für $x\in [-a,a]^d$ motiviert. Sei dafür $M\in\mathbb{N}$ und $\mathbf{i}=(i^{(1)},\ldots,i^{(d)})\in\{0,\ldots,M\}^d$, sei

$$x_{\mathbf{i}} = \left(-a + i^{(1)} \cdot \frac{2a}{M}, \dots, -a + i^{(d)} \cdot \frac{2a}{M}\right)$$

und sei

$$\{\mathbf{i}_1,\ldots,\mathbf{i}_{(M+1)^d}\}=\{0,\ldots,M\}^d,$$

d.h. $\mathbf{i}_1, \dots, \mathbf{i}_{(M+1)^d}$ sind insgesamt M+1 Vektoren der Dimension d, wobei jede Komponente aus der Menge $\{0,\dots,M\}$ ausgewählt wurde. Für $k \in \{1,\dots,(M+1)^d\}$ sei

$$p_{\mathbf{i}_{k}}(x) = \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, q\} \\ j_{1} + \dots + j_{d} \leq q}} \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1} + \dots + j_{d}} m}{\partial^{j_{1}} x^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} x^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}}) \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}}$$

das Taylorpolynom von m der Ordnung q im Entwicklungspunkt $x_{\mathbf{i}_k}$ und sei

$$P(x) = \sum_{k=1}^{(M+1)^d} p_{\mathbf{i}_k}(x) \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+, \tag{2.2}$$

mit $z_+ = \max\{z,0\}(z \in \mathbb{R})$. Wir zeigen im folgenden Lemma dass P(x) eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen von m ist.

Lemma 2.1. *Sei* $a > 0, M \in \mathbb{N}$ *und*

$$P(x) = \sum_{k=1}^{(M+1)^d} p_{\mathbf{i}_k}(x) \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+$$

mit $p_{\mathbf{i}_k}(x)$ wie oben, dann ist P(x) eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen von m.

Beweis. Es sind drei Bedingungen zu überprüfen. Als erstes geben wir aber für d=2 und M=3 eine Skizze an um die Idee des Beweises zu veranschaulichen. (SKIZZE EINFÜGEN) Es ist ein Gitter mit $(M+1)^d$ Gitterpunkten die den $x_{\mathbf{i}_k}$ entsprechen. Der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten beträgt $\frac{2a}{M}$. Man betrachtet immer den Abstand zu den nähesten 2^d Gitterpunkten, da $(1-\frac{M}{2a}\cdot|x^{(j)}-x^{(j)}_{\mathbf{i}_k}|)_+=0$ immer dann gilt, wenn der Abstand zwischen $x^{(j)}$ und $x^{(j)}_{\mathbf{i}_k}$ größer als $\frac{2a}{M}$ ist.

i) Im folgenden wollen wir

$$\sum_{k=1}^{(M+1)^d} \prod_{i=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+ = 1,$$

per Induktion über d zeigen.

Induktionsanfang (IA): Für d=1 kann nur zwischen zwei Gitterpunkten liegen und mit der obigen Begründung ist der Rest gleich Null, daher nehmen wir oBdA an, dass x zwischen x_{i_1} und x_{i_2} liegt. Damit folgt

$$\begin{split} \sum_{k=1}^{(M+1)} (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - x_{\mathbf{i}_k}|)_+ &= (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - x_{\mathbf{i}_1}|)_+ + (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - x_{\mathbf{i}_2}|)_+ \\ &= 1 + 1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - x_{\mathbf{i}_1} + x_{\mathbf{i}_2} - x| \\ &= 1 + 1 - \frac{M}{2a} \cdot \frac{2a}{M} \\ &= 1, \end{split}$$

wobei wir unter anderem verwendet haben, dass beide Summenden unabhängig von dem Positivteil nichtnegativ sind, da der Abstand von x zu den beiden Gitterpunkten $x_{\mathbf{i}_1}$ und $x_{\mathbf{i}_2}$ kleiner gleich $\frac{2a}{M}$ ist. Zudem haben wir verwendet, dass $x_{\mathbf{i}_2} - x_{\mathbf{i}_1} = \frac{2a}{M}$ gilt, da beides Gitterpunkte sind.

Induktionshypothese (IH): Aussage i) gilt für eine beliebiges aber festes $d \in \mathbb{N}$. Induktionsschritt (IS): Wir nehmen oBdA. an, dass $x_{(0,\dots,0) \leq x \leq x_{(1,\dots,1}}$ gilt, mit $\mathbf{i}_1 = (0,\dots,0)$ und $\mathbf{i}_{(M+1)}^{d+1} = (1,\dots,1)$. Das heißt also, dass $x \in [-a,-a+\frac{2a}{M}]^{d+1}$ gilt. Im folgenden zeigen wir

$$\sum_{k=1}^{(M+1)^{d+1}} \prod_{j=1}^{d+1} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+ = 1.$$

Alle Summanden sind Null, wenn $|x^{(j)}-x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}|\geq \frac{2a}{M}$ ist. Zudem haben wir oBdA angenommen dass $x\in [-a,-a+\frac{2a}{M}]^{d+1}$ gilt, damit haben wir also nur noch 2^{d+1} Summanden, nämlich die Anzahl der Gitterpunkte die am nähesten zu x sind. Zudem wissen wir, dass alle Gitterpunkte, die in der (d+1) Komponente den selben Wert haben, sind in dieser Dimension gleich weit von $x^{(d+1)}$ entfernt. Das heißt, in jedem Summanden kommt der Faktor $(1-\frac{M}{2a}\cdot|x^{(d+1)}-x_{(0,\ldots,0)}^{(d+1)}|)$ bzw. $(1-\frac{M}{2a}\cdot|x^{(d+1)}-x_{(1,\ldots,1)}^{(d+1)}|)$ vor, da

$$(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_i^{(d+1)}|) = \begin{cases} (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(0,\dots,0)}^{(d+1)}|) & i \in \{0,1\}^d \times \{0\} \\ (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)}|) & i \in \{0,1\}^d \times \{1\} \end{cases}$$

daraus ergibt sich:

$$\begin{split} \sum_{k=1}^{(M+1)^{d+1}} \prod_{j=1}^{d+1} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(j)}| \right)_{+} \\ &= \sum_{i \in \{0,1\}^{d+1}} \prod_{j=1}^{d+1} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{i}^{(j)}| \right) \\ &= \left(\sum_{i \in \{0,1\}^{d} \times \{0\}} \prod_{j=1}^{d} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{i}^{(j)}| \right) \right) \cdot \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(0,\dots,0)}^{(d+1)}| \right) \\ &+ \left(\sum_{i \in \{0,1\}^{d} \times \{1\}} \prod_{j=1}^{d} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{i}^{(j)}| \right) \right) \cdot \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)}| \right) \\ &= 1 \cdot \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(0,\dots,0)}^{(d+1)}| \right) + 1 \cdot \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)}| \right) \\ &= 1 + 1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(0,\dots,0)}^{(d+1)}| + x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)} - x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)}| \\ &= 1 + 1 - 1 \\ &= 1, \end{split}$$

wobei wir bei der vorletzten Gleichung angewendet haben, dass $x_{(1,\dots,1)}-x_{(0,\dots,0)}=\frac{2a}{M}$ ist, da beides Gitterpunkte sind.

ii) Es folgt
$$\prod_{j=1}^{d} (1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}|)_+ \ge 0$$
 für alle $k = 1, \dots, (M+1)^d$, da

$$z_+ = \max\{z, 0\} \ge 0 (z \in \mathbb{R})$$

gilt. Damit wäre die Nichtnegativität der Koeffizienten der Linearkombination gezeigt. Damit ist jeder Summand in

$$\sum_{k=1}^{(M+1)^d} \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+$$

größer gleich Null und wegen i) muss dann auch

$$\prod_{j=1}^{d} \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(j)}| \right)_{+} \le 1$$

gelten.

iii) Es handelt sich hierbei um eine lokale Konvexität, da die Bedingungen i) und ii) für alle $x \in [-a, a]$ gelten.

Als nächstes zeigen wir ein Resultat für (p,C)-glatte Funktion welches wir im weiteren Verlauf dieser Arbeit wieder benötigen werden.

Lemma 2.2. Sei $M \in \mathbb{N}$, c_1 eine Konstante, a > 0 und m eine (p,C)-glatte Funktion, wobei p = q + s mit $q \in \mathbb{N}_0$ und $s \in (0,1]$. Sei zudem P(x) wie in (2.2) eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen von m. Dann gilt:

$$\sup_{x \in [-a,a]^d} |m(x) - P(x)| \le c_1 \cdot \frac{1}{M^p}.$$

Beweis. Nach dem Satz über die Lagrange Form des Restglieds (REFERENZ) existiert ein $\xi \in [x, x_{\mathbf{i}_k}]$, so, dass

$$\begin{split} m(x) &= T_{x_{\mathbf{i}_{k}},q-1}[m(x)] \\ &= \sum_{\substack{j_{1},\dots,j_{d} \in \{0,\dots,q-1\}\\j_{1}+\dots+j_{d} \leq q-1}} \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1}+\dots+j_{d}} m(x_{\mathbf{i}_{k}})}{\partial^{j_{1}} x^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}} \\ &+ \sum_{\substack{q-1 < j_{1},\dots,j_{d} \leq q\\j_{1}+\dots+j_{d} \leq q}} \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1}+\dots+j_{d}} m(\xi)}{\partial^{j_{1}} x^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}}. \end{split}$$

Nach dem Beweis von Lemma 2.2 i) erhalten wir

$$m(x) = \sum_{k=1}^{(M+1)^d} m(x) \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+.$$

Zudem wissen wir dass man immer den Abstand zu den nähesten 2^d Gitterpunkten betrachtet, da $(1-\frac{M}{2a}\cdot|x^{(j)}-x^{(j)}_{\mathbf{i}_k}|)_+=0$ immer dann gilt, wenn der Abstand zwischen $x^{(j)}$ und $x^{(j)}_{\mathbf{i}_k}$ größer als $\frac{2a}{M}$ ist, daher ergibt sich:

$$\sum_{\substack{q-1 < j_1, \dots, j_d \le q \\ j_1 + \dots + j_d \le q}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(\xi)}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d}$$

$$\leq \sum_{\substack{q-1 < j_1, \dots, j_d \le q \\ j_1 + \dots + j_d \le a}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(\xi)}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot \left(\frac{2a}{M}\right)^q$$

und folgern mithilfe der Dreiecksungleichung und der (p,C)-Glattheit von m:

$$\begin{split} |m(x) - P(x)| &\leq \sum_{k=1}^{(M+1)^d} |m(x) - p_{\mathbf{i}_k}| \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+ \\ &\leq \left(\frac{2a}{M} \right)^q \|\xi - x_{\mathbf{i}_k}\|^s \cdot C \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^d} \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}| \right)_+ \\ &= C \cdot \left(\frac{2a}{M} \right)^p \\ &= c_1 \cdot \frac{1}{M^p}, \end{split}$$

wobei wir bei der letzten Gleichung Bedingung i) aus dem Beweis von Lemma 2.2 und q+s=p verwendet haben.

P(x) lässt sich in die Form

$$\sum_{k=1}^{(M+1)^d} \sum_{\substack{j_1,\dots,j_d \in \{0,\dots,q\}\\j_1+\dots+j_d \leq q}} a_{\mathbf{i}_k,j_1,\dots,j_d} \cdot (x^{(1)} - x^{(1)}_{\mathbf{i}_k})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x^{(d)}_{\mathbf{i}_k})^{j_d} \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x^{(j)}_{\mathbf{i}_k}|\right)_+$$

durch geeignet gewählte $a_{\mathbf{i}_k,j_1,\dots,j_d}\in\mathbb{R}$ bringen. Als nächstes wollen wir geeignete neuronale Netze $f_{net,j_1,\dots,j_d,\mathbf{i}_k}$ definieren, die die Funktionen

$$x \mapsto (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d} \prod_{j=1}^d \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}|\right)_+$$

approximieren. Zudem möchten wir die Netzwerkarchitektur so wählen, dass neuronale Netze der Form

$$\sum_{k=1}^{(M+1)^d} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d} \cdot f_{net, j_1, \dots, j_d, \mathbf{i}_k}(x) \qquad (a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d} \in \mathbb{R})$$

in ihr enthalten sind. Um dies zu erreichen, sei $\sigma(x) = \frac{1}{(1 + \exp(-x))}$ $(x \in \mathbb{R})$ der logistische Squasher (1.1), wählen $R \ge 1$ und definieren die folgenden neuronale Netze: Das neuronale Netz

$$f_{id}(x) = 4R \cdot \sigma\left(\frac{x}{R}\right) - 2R,\tag{2.3}$$

welches, wie in Lemma 1.6 gezeigt, die Funktion f(x) = x approximiert. Das neuronale Netz

$$f_{mult}(x,y) = \frac{R^2}{4} \cdot \frac{(1 + \exp(-1))^3}{\exp(-2) - \exp(-1)} \cdot \left(\sigma\left(\frac{2(x+y)}{R} + 1\right) - 2 \cdot \sigma\left(\frac{x+y}{R} + 1\right) - \sigma\left(\frac{x+y}{R} + 1\right)\right) - \sigma\left(\frac{2(x-y)}{R} + 1\right) + 2 \cdot \sigma\left(\frac{x-y}{R} + 1\right),$$
(2.4)

welches, wie in Lemma 1.7 gezeigt, die Funktion $f(x,y) = x \cdot y$ approximiert. Das neuronale Netz

$$f_{ReLu}(x) = f_{mult}(f_{id}(x), \sigma(R \cdot x)), \tag{2.5}$$

welches, wie in Lemma 1.8 gezeigt, die Funktion $f(x) = x_+$ approximiert und schließlich noch das neuronale Netz

$$f_{hat,y}(x) = f_{ReLu}\left(\frac{M}{2a}\cdot(x-y) + 1\right) - 2\cdot f_{ReLu}\left(\frac{M}{2a}\cdot(x-y)\right) + f_{ReLu}\left(\frac{M}{2a}\cdot(x-y) - 1\right),\tag{2.6}$$

welches, wie in Lemma 1.9 gezeigt, für fixes $y \in \mathbb{R}$ die Funktion

$$f(x) = \left(1 - \left(\frac{M}{2a}\right) \cdot |x - y|\right)_{+}$$

approximiert. Mit diesen neuronalen Netzen können wir nun $f_{net,j_1,\ldots,j_d,\mathbf{i}_k}$ rekursiv definieren. Dafür wählen wir $N \geq q$, setzen $s = \lceil \log_2(N+d) \rceil$ und definieren für $j_1,\ldots,j_d \in \{0,1,\ldots,N\}$ und $k \in \{1,\ldots,(M+1)^d\}$:

$$f_{net,j_1,...,j_d,\mathbf{i}_k}(x) = f_1^{(0)}(x).$$

wobei

$$f_k^{(l)}(x) = f_{mult}\left(f_{2k-1}^{(l+1)}(x), f_{2k}^{(l+1)}(x)\right)$$

für $k \in \{1, 2, \dots, 2^l\}$ und $l \in \{0, \dots, s-1\}$, und

$$f_k^{(s)}(x) = f_{id}(f_{id}(x^{(l)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(l)}))$$

für $j_1+j_2+\cdots+j_{l-1}+1\leq k\leq j_1+j_2+\cdots+j_l$ und $l=1,\ldots,d$ und

$$f_{j_1+j_2+\dots+j_d+k}^{(s)}(x) = f_{hat,x_{\mathbf{i}_L}^{(k)}}(x^{(k)})$$

für $k = 1, \dots, d$ und

$$f_k^{(s)}(x) = 1$$

für
$$k = j_1 + j_2 + \dots + j_d + d + 1, j_1 + j_2 + \dots + j_d + d + 2, \dots, 2^s$$
.

ANZAHL DER SCHICHTEN UND NEURONEN PRO SCHICHT ERLÄUTERN. Da man bei fully-connencted neuronalen Netzen die Gewichte der Verbindungen zwischen zwei Neuronen auf Null setzen kann, sind auch nicht fully-connected neuronale Netze in der der Klasse aller fully-connected neuronaler Netze, mit s+2 verbogenen Schichten mit jeweils $24 \cdot (N+d)$ Neuronen pro Schicht, enthalten und damit auch insbesondere $f_{net,j_1,...,j_d,\mathbf{i}_k}$.

2.2 Definition der Gewichte der Ausgabeschicht

Wir definieren unseren neuronale Netze Regressionsschätzer $\tilde{m}_n(x)$ durch:

$$\tilde{m}_{n}(x) = \sum_{k=1}^{(M+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, N\}\\ j_{1}+\dots+j_{d} < N}} a_{\mathbf{i}_{k}, j_{1}, \dots, j_{d}} \cdot f_{net, j_{1}, \dots, j_{d}, \mathbf{i}_{k}}(x), \tag{2.7}$$

wobei wir die Koeffizienten $a_{\mathbf{i}_k,j_1,...,j_d}$ durch Minimierung von

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - \tilde{m}_n(X_i)|^2 + \frac{c_3}{n} \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^d} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, N\}\\j_1 + \dots + j_d < N}} a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d}^2$$
(2.8)

für eine Konstante $c_3 > 0$. Dieses regularisierte lineare Kleinste-Quadrate Schätzung erhalten wir durch die Lösung eine linearen Gleichungssystems. Dafür definieren wir uns

$$\{B_j \mid j = 1, \dots, J\} = \{f_{net, j_1, \dots, j_d, \mathbf{i}_k}(x) \mid 1 \le k \le (1 + M)^d \text{ und } 0 \le j_1 + \dots + j_d \le N\}$$

wobei

$$J = (M+1)^d \cdot \binom{N+d}{d}$$

die Kardinalität der Menge ist. Dies erhält man durch TBD. Wir setzen nun

$$\mathbf{B} = (B_j(X_i))_{1 \le i \le n, 1 \le j \le J}$$
 und $\mathbf{Y} = (Y_i)_{i=1,\dots,n}$.

Wir zeigen im Folgenden, dass der Koeffizientenvektor unseres Schätzers 2.7 die eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\left(\frac{1}{n}\mathbf{B}^T\mathbf{B} + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{1}\right)\mathbf{a} = \frac{1}{n}\mathbf{B}^T\mathbf{Y},\tag{2.9}$$

wobei 1 eine JxJ-Einheitsmatrix ist. Den Schätzer aus 2.7 kann man umschreiben zu

$$\tilde{m}_n(x) = \sum_{j=1}^J a_j \cdot B_j(x)$$

wobei $\mathbf{a} = (a_j)_{j=1,\dots,J} \in \mathbb{R}^J$ wie in 2.8 den Ausdruck

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - \tilde{m}_n(X_i)|^2 + \frac{c_3}{n} \cdot \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \le q}} a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d}^2$$

$$= \frac{1}{n} (\mathbf{Y} - \mathbf{B} \mathbf{a})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{B} \mathbf{a}) + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{a}^T \mathbf{a}$$

$$= \frac{1}{n} (\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T \mathbf{B} \mathbf{a} - \mathbf{a}^T \mathbf{B}^T \mathbf{Y} + \mathbf{a}^T \mathbf{B}^T \mathbf{B} \mathbf{a}) + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{a}^T \mathbf{a}$$

$$= \frac{1}{n} (\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T \mathbf{B} \mathbf{a}) + \mathbf{a}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{B}^T \mathbf{B} + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{1} \right) \mathbf{a},$$
(2.10)

minimiert. In der vorletzten Gleichung haben wir verwendet das $\mathbf{Y}^T\mathbf{Ba} = \mathbf{a}^T\mathbf{B}^T\mathbf{Y}$ gilt, da dieser Ausdruck eine reelle Zahl und damit insbesondere symmetrisch ist. Die Matrix $\mathbf{B}^T\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{JxJ}$ ist positiv semidefinit, denn aufgrund der Verschiebungseigenschaft des Standardskalarprodukts gilt für alle $x \in \mathbb{R}$:

$$\langle x, \mathbf{B}^{\mathsf{T}} \mathbf{B} x \rangle = \langle \mathbf{B} x, \mathbf{B} x \rangle \ge 0.$$

Zudem wissen wir dass $\frac{c_3}{n}$ 1 durch die Wahl von c_3 nur positive Eigenwerte besitzt und damit positiv definit ist. Daher wissen wir, dass die Matrix

$$\mathbf{A} = \frac{1}{n} \mathbf{B}^T \mathbf{B} + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{1}$$

ebenfalls nur positive Eigenwerte besitzt (REFERENZ), damit also positiv definit ist und eine inverse Matrix \mathbf{A}^{-1} existiert. Zudem ist die Matrix \mathbf{A} symmetrisch. Mit $\mathbf{b} = \frac{1}{n} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y} \in \mathbb{R}^J$ und $\mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{a} = \mathbf{a} \mathbf{A} \mathbf{b} = \mathbf{Y}^T \mathbf{B} \mathbf{a}$, was aus der Symmetrie von \mathbf{A} folgt, erhalten wir:

$$\frac{1}{n}(\mathbf{Y}^{T}\mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^{T}\mathbf{B}\mathbf{a}) + \mathbf{a}^{T}\left(\frac{1}{n}\mathbf{B}^{T}\mathbf{B} + \frac{c_{3}}{n}\cdot\mathbf{1}\right)\mathbf{a}$$

$$= \mathbf{a}^{T}\mathbf{A}\mathbf{a} + \mathbf{b}^{T}\mathbf{A}\mathbf{a} + \mathbf{a}^{T}\mathbf{A}\mathbf{b} + \mathbf{b}^{T}\mathbf{A}\mathbf{b} + \frac{1}{n}\mathbf{Y}^{T}\mathbf{Y} - \frac{1}{n^{2}}\mathbf{Y}^{T}\mathbf{B}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}^{T}\mathbf{Y}$$

$$= (\mathbf{a} + \frac{1}{n}\cdot\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}^{T}\mathbf{Y})^{T}\mathbf{A}(\mathbf{a} - \frac{1}{n}\cdot\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}^{T}\mathbf{Y}) - \frac{1}{n}\mathbf{Y}^{T}\mathbf{Y} - \frac{1}{n^{2}}\mathbf{Y}^{T}\mathbf{B}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}^{T}\mathbf{Y}.$$

Die letzte Gleichung wird für $\mathbf{a} = \frac{1}{n} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y}$ minimal, da wir wissen dass \mathbf{A} positiv definit ist und damit $x^T \mathbf{A} x > 0$ für alle $x \in \mathbb{R}^J$ mit $x \neq 0$ gilt und $(\mathbf{a} - \mathbf{b})^T \mathbf{A} (\mathbf{a} - \mathbf{b}) = 0$ ist für $\mathbf{a} = \mathbf{b}$. Dies zeigt also, dass der Koeffizientenvektor unseres Schätzers 2.7 die eindeutige Lösung des linearen Gleichungssystems 2.9 ist. Da der Koeffizientenvektor die Gleichung 2.8 minimiert, erhalten wir wenn wir den Koeffizientenvektor mit dem Nullvektor gleichsetzen:

$$\frac{1}{n}(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{a})^T(\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{a}) + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{a}^T \mathbf{a} \le \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2,$$

was uns erlaubt eine obere Schranke für den absoluten Wert unsere Koeffizienten abzuleiten.

Kapitel 3

Resultat zur

Konvergenzgeschwindigkeit

In diesem Kapitel stellen wir das Hauptresultat dieser Arbeit vor. Ziel im Folgenden ist es, eine Abschätzung des erwarteten L_2 -Fehlers

$$\mathbb{E}\int |m_n(x)-m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx)$$

im Falle unseres neuronale Netze Regresssionsschätzers 2.7 mit einer (p,C)-glatten Regressionsfunktion herzuleiten.

Satz 3.1. Angenommen die Verteilung von (X,Y) erfüllt

$$\mathbb{E}\left(\mathrm{e}^{c_4\cdot|Y|^2}\right)<\infty$$

für eine Konstante $c_4 > 0$ und die Verteilung von X hat einen beschränkten Träger $supp(\mathbb{P}_X)$. Sei $m(x) = \mathbb{E}[Y \mid X = x]$ die entsprechende Regressionsfunktion. Angenommen m ist (p,C)-glatt, mit p = q + s für $q \in \mathbb{N}_0$ und $s \in (0,1]$. Wir betrachten unseren neuronale Netze Regressionsschätzer \tilde{m}_n aus 2.7, wobei σ der logistische squasher ist und $N \geq q, M = M_n = \lceil c_5 \cdot n^{1/(2p+d)} \rceil, R = R_n = n^{d+4}$ und $a = a_n = (\log n)^{1/(6(N+d))}$. Sei $\beta_n = c_6 \cdot \log(n)$ für eine hinreichend große Konstante $c_6 > 0$ und sei m_n gegeben durch

$$m_n(x) = T_{\beta_n} \tilde{m}_n(x)$$

mit $T_{\beta}z = \max\{\min\{z,\beta\}, -\beta\}$ für $z \in \mathbb{R}$ und $\beta > 0$. Dann erhalten wir für hinreichend großes n:

$$\mathbb{E}\int |m_n(x)-m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \leq c_7 \cdot (\log n)^3 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}},$$

wobei $c_7 > 0$ ist und nicht von n abhängt.

Beweis. Nach Voraussetzung wissen wir, dass $supp(\mathbb{P}_X)$ beschränkt ist, daher nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass $supp(X) = \{x \mid \mathbb{P}_X(x) > 0\} \subseteq [-a_n, a_n]^d$ ist, da $\mathbb{P}(X \in supp\mathbb{P}_X)) = 1$ gilt und wir ansonsten die Zufallsvariable X auf Nullmengen abändern können. Zudem haben wir angenommen, dass m (p,C)-glatt und damit insbesondere hölderstetig mit q=0 ist. Daraus können wir auf die gleichmäßige Stetigkeit von m schließen [Sto18]. Da wir nur über den beschränkten $supp(\mathbb{P}_X)$ integrieren, wissen wir, dass m als gleichmäßig stetige Funktion auf einer beschränkten Menge auch beschränkt ist [Sto18]. Wir können daher ohne Beschränkung der Allgemeinheit folgern, dass $||m||_{\infty} \leq \beta_n$ ist, da aufgrund der Beschränktheit von m, ebenfalls |m| beschränkt ist und wir daher ansonsten eine Skalierung von m nehmen können.

Sei \mathscr{F} die durch 2.1 definierte Menge von Funktionen mit $L = s + 2 = \lceil \log_2(N+d) \rceil + 2$, mit $k_1 = k_2 = \cdots = k_L = 24 \cdot (N+d)$ und der Eigenschaft, dass der Betrag der Gewichte durch $n^{c_{20}}$ beschränkt ist. Sei

$$\mathscr{F}^{(J_n)} = \left\{ \sum_{j=1}^{J_n} a_j \cdot f_j : f_j \in \mathscr{F} \quad \text{und} \quad \sum_{j=1}^{J_n} a_j^2 \le c_{21} \cdot n \right\}$$

wobei c_{21} in (3.3) gewählt wird und

$$J_n = (M_n + 1)^d \cdot |\{(j_1, \dots, j_d) : j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, N\}, j_1 + \dots + j_d \leq N\}|,$$

die Kardinalität der Menge $\mathscr{F}^{(J_n)}$ ist. Ohne die Restriktion $j_1+\cdots j_d\leq N$ lässt sich

$$|\{(j_1,\ldots,j_d):j_1,\ldots,j_d\in\{0,\ldots,N\}|$$

durch eine Analogie zu einem Urnenexperiment bestimmten. Wir betrachten die Anzahl an Möglichkeiten, wie man d-Mal mit Zurücklegen (da auch mehrere Komponenten den gleichen Wert haben können) und mit Beachtung der Reihenfolge (da wir einen Vektor betrachten und die Komponenten nicht vertauschen können) aus (N+1) Kugeln ziehen kann. Durch das Weglassen der Restriktion $j_1 + \cdots + j_d \leq N$ erhalten wir:

$$J_n \le (M_n + 1)^d \cdot (N + 1)^d. \tag{3.1}$$

Da nach Voraussetzung m (p,C)-glatt ist, und $x_{\mathbf{i}_k} \in \mathbb{R}^d$ für alle $k=1,\ldots,(M_n+1)^d$, folgt:

$$\max_{k \in \{1, \dots, (M_n+1)^d\}, j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\}, j_1 + \dots + j_d \le q} \left| \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_k}) \right| < \infty, \tag{3.2}$$

denn das größte Elemente muss auch beschränkt sein, wenn der Abstand zweier beliebiger Elemente beschränkt ist. Da wir uns in der nichtparametrischen Regressionsschätzung befinden und dafür als Bedingung $\mathbb{E}[Y^2] < \infty$ gelten muss, wählen wir mit dem bisher gezeigten:

$$c_{21} = \max \left\{ \frac{1 + \mathbb{E}[Y^{2}]}{c_{3}}, (N+1)^{d} \cdot \max \left\{ \left| \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1} + \cdots + j_{d}} m}{\partial^{j_{1}} \chi^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} \chi^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}}) \right|^{2} : \right.$$

$$(3.3)$$

$$j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, q\}, j_{1} + \dots + j_{d} \leq q \right\} \right\}.$$

Sei

$$g_n(x) = \sum_{k=1}^{(M_n+1)^d} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d < q}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_k}) \cdot f_{net, j_1, \dots, j_d, \mathbf{i}_k}(x).$$

Da nach Konstruktion $f_{net,j_1,...,j_d,\mathbf{i}_k} \in \mathscr{F}$ ist, folgt mit (3.3), dass g_n in $\mathscr{F}^{(J_n)}$ liegt. Sei A_n das Event, dass

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y_i^2 \le 1 + \mathbb{E}[Y^2] \tag{3.4}$$

gilt. Wir wissen, dass aufgrund der Unabhängigkeit der $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ -wertigen Zufallsvariablen $(X,Y),(X_1,Y_1),(X_2,Y_2),\ldots$ mit

$$\mathbb{P}(Y_1 \in \mathbb{R}, \dots, Y_n \in R) = \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \dots, (X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$$
$$= \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \cdots \mathbb{P}((X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$$
$$= \mathbb{P}(Y_1 \in \mathbb{R}) \cdots \mathbb{P}(Y_n \in R),$$

und durch

$$\mathbb{P}(Y_1 \in \mathbb{R}, \dots, Y_n \in R) = \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \dots, (X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$$

$$= \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \cdots \mathbb{P}((X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})$$

$$= \mathbb{P}((X, Y) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})^n$$

$$= \mathbb{P}(Y \in \mathbb{R})^n$$

dass die Zufallsvariablen Y_1, \ldots, Y_n auch unabhängig und identisch verteilt sind. Daraus folgern wir $\mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Y_i^2\right] = \mathbb{E}\left[Y^2\right]$ mit der Linearität des Erwartungswerts. Mit Hilfe der Monotonie und Homogenität der Wahrscheinlichkeitsfunktion \mathbb{P} und der Tschebyscheff

Ungleichung für $\varepsilon = 1$ (REFERENZ) erhalten wir:

$$\mathbb{P}(A_n^{\mathsf{c}}) = \mathbb{P}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \mathbb{E}\left[Y^2\right] \ge 1\right)$$

$$\leq \mathbb{P}\left(\left|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Y_i^2 - \mathbb{E}\left[Y^2\right]\right| \ge 1\right)$$

$$\leq \mathbb{V}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n Y_i^2\right]$$

$$= \frac{n \cdot \mathbb{V}\left[Y^2\right]}{n^2}$$

$$= \frac{\mathbb{V}\left[Y^2\right]}{n}$$

$$\leq \frac{c_{22}}{n},$$
(3.5)

wobei wir bei der letzten Gleichheit die identische Verteiltheit der Y_1, \ldots, Y_n und Rechenregeln für die Varianz verwendet haben welche wir unter anderem aufgrund der Unabhängigkeit der Y_1, \ldots, Y_n verwenden durften. Sei $\hat{m}_n = T_{\beta_n} \tilde{m}_n = m_n$ im Falle dass Ereignis A_n gilt und andernfalls $\hat{m}_n = T_{\beta_n} g_n$. Durch die Unabhängigkeit von A_n zu den Zufallsvariablen X, X_1, \ldots, X_n und der Jensenschen Ungleichung (REFERENZ) erhalten wir:

$$\mathbb{E}\left[\int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \mathbb{1}_{A_{n}^{\mathsf{c}}}\right] = \mathbb{E}\left[\int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)\right] \cdot \mathbb{P}(A_{n}^{\mathsf{c}})$$

$$\leq \mathbb{E}\left[2m_{n}(x)^{2} + 2m(x)^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)\right] \cdot \mathbb{P}(A_{n}^{\mathsf{c}})$$

$$\leq \mathbb{E}\left[2\beta_{n}^{2} + 2\beta_{n}^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)\right] \cdot \mathbb{P}(A_{n}^{\mathsf{c}})$$

$$= 4\beta_{n}^{2} \cdot \mathbb{P}(A_{n}^{\mathsf{c}}),$$
(3.6)

wobei wir bei der letzten Ungleichung verwendet haben dass wir anfangs angenommen haben, dass $||m||_{\infty} < \beta_n$ und damit für c_6 und n hinreichend groß auch $\tilde{m}_n \leq \beta_n$ und nach der Definition von m_n zudem $m_n \leq \beta_n$ gilt. Bei der letzten Gleichung habe wir dann schließlich noch verwendet dass β_n deterministisch und $\mathbb{P}(X \in supp(\mathbb{P}_X)) = 1$ ist. Durch unsere Definition von \hat{m}_n erhalten wir durch die Monotonie des Erwartungswert und der Abschätzung durch den ganzen Raum:

$$\mathbb{E}\left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n}\right] = \mathbb{E}\left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n}\right]$$

$$\leq \mathbb{E}\left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx)\right].$$
(3.7)

Zusammen mit (3.5), (3.6), (3.7) und der Linearität des Erwartungswerts erhalten wir

dann:

$$\mathbb{E} \int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) = \mathbb{E} \left[\int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \cdot (\mathbb{1}_{A_{n}^{c}} + \mathbb{1}_{A_{n}}) \right]$$

$$= \mathbb{E} \left[\int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \mathbb{1}_{A_{n}^{c}} \right]$$

$$+ \mathbb{E} \left[\int |m_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \mathbb{1}_{A_{n}} \right]$$

$$\leq 4\beta_{n}^{2} \cdot \mathbb{P}(A_{n}^{c}) + \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \right]$$

$$\leq \frac{4 \cdot c_{22} \cdot \beta_{n}^{2}}{n} + \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) \right].$$
(3.8)

Nach (2.7) können wir unseren Schätzer \tilde{m}_n darstellen durch:

$$\tilde{m}_n(x) = \sum_{j=1}^{J_n} \hat{a}_j \cdot f_j$$

für geeignete $f_j \in \mathscr{F}$ und \hat{a}_j welche

$$\frac{c_3}{n} \sum_{j=1}^{J_n} \hat{a}_j^2 = \frac{c_3}{n} \sum_{k=1}^{(M+1)^d} \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \le q}} a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d}^2 \\
\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - \tilde{m}_n(X_i)|^2 + \frac{c_3}{n} \cdot \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \le q}} a_{\mathbf{i}_k, j_1, \dots, j_d}^2 \\
\leq \sum_{i=1}^n Y_i^2,$$

erfüllen, wobei wir bei der letzten Ungleichung wie in (2.8) die minimierende Eigenschaft von $a_{\mathbf{i}_k,j_1,...,j_d}$ verwendet haben und zum Schluss die Koeffizienten Null gesetzt haben. Da $c_3 > 0$ ist, erhalten wir dass die Koeffizienten \hat{a}_j die Eigenschaft

$$\sum_{j=1}^{J_n} \hat{a}_j^2 \le \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2 \cdot \frac{n}{c_3}$$

erfüllen müssen. Auf A_n erhalten wir dann:

$$\sum_{i=1}^{J_n} \hat{a}_j^2 \stackrel{(3.4)}{\leq} \frac{1 + \mathbb{E}[Y^2]}{c_3} \cdot n \stackrel{(3.3)}{\leq} c_{21} \cdot n,$$

woraus durch $f_j \in \mathscr{F}$ dann $\tilde{m}_n \in \mathscr{F}^{(J_n)}$ folgt. Deswegen nehmen wir nun ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\hat{m}_n = T_{\beta_n} \bar{m}_n$ für $\bar{m}_n \in \{\tilde{m}_n, g_n\} \subseteq \mathscr{F}^{(J_n)}$ an. Da $c_3 > 0$ ist, erhalten

wir:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2}
\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2}
+ \frac{c_{3}}{n} \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, q\}\\ j_{1} + \dots + j_{d} \leq q}} \left| \frac{1}{j_{1}! \dots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1} + \dots + j_{d}} m}{\partial^{j_{1}} \chi^{(1)} \dots \partial^{j_{d}} \chi^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}}) \right|^{2}
\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2} + \frac{c_{3}}{n} \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^{d}} c_{21}
= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2} + \frac{c_{3} \cdot c_{21} \cdot (M_{n} + 1)^{d}}{n}
= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2} + c_{23} \cdot \frac{(M_{n} + 1)^{d}}{n}.$$
(3.9)

Die Funktionen \tilde{m}_n und g_n unterscheiden sich in den Vorfaktoren von f_j . Da wir die Koeffizienten $a_{\mathbf{i}_k,j_1,...,j_d}$ von \tilde{m}_n durch Minimierung von (2.8) erhalten haben und nach Voraussetzung $N \ge q$ ist, damit dann $\{0,\ldots,q\} \subseteq \{0,\ldots,N\}$ und wir bei der Minimierung daher auch insbesondere die Koeffizienten von g_n betrachtet haben, erhalten wir:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - \tilde{m}_{n}(X_{i})|^{2}
\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - \tilde{m}_{n}(X_{i})|^{2} + \frac{c_{3}}{n} \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, N\}\\j_{1} + \dots + j_{d} \leq N}} a_{\mathbf{i}_{k}, j_{1}, \dots, j_{d}}^{2}
\leq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2}
+ \frac{c_{3}}{n} \cdot \sum_{k=1}^{(M+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, q\}\\j_{1} + \dots + j_{d} \leq q}} \left| \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1} + \dots + j_{d}} m}{\partial^{j_{1}} \chi^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} \chi^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}}) \right|^{2}
= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_{i} - g_{n}(X_{i})|^{2} + c_{23} \cdot \frac{(M_{n} + 1)^{d}}{n}$$
(3.10)

Mit (3.9) und (3.10) erhalten wir zusammen:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - \bar{m}_n(X_i)|^2 \le \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |Y_i - g_n(X_i)|^2 + c_{23} \cdot \frac{(M_n + 1)^d}{n}.$$
 (3.11)

Da g_n nach Definition deterministisch, damit also unabhängig von $(X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \ldots$ ist, sind mit $|\Theta_n| = 1$, $g_{n,1} = g_n$, der Abschätzung (3.11) für $\hat{m}_n = \mathscr{T}_{\beta_n} \bar{m}_n$ mit $\hat{m}_n \in \mathscr{F}^{(J_n)}$ und

dem penalty Term $pen_n(g_{n,1}) = c_{23} \cdot \frac{(M_n+1)^d}{n} > 0$ die Voraussetzungen für Lemma 1.11 erfüllt und wir erhalten durch dessen Anwendung:

$$\mathbb{E} \int |\hat{m}_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)$$

$$\leq \frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(\log\left(\sup_{x_{1}^{n} \in (supp(X))^{n}} \mathcal{N}_{1}\left(\frac{1}{n \cdot \beta_{n}}, \mathcal{F}^{(J_{n})}, x_{1}^{n}\right)\right) + 1\right)}{n}$$

$$+ 2 \cdot \mathbb{E} \left(\min_{l \in \Theta_{n}} \int |g_{n,l}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) + c_{23} \cdot \frac{(M_{n} + 1)^{d}}{n}\right)$$

$$= \frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(\log\left(\sup_{x_{1}^{n} \in (supp(X))^{n}} \mathcal{N}_{1}\left(\frac{1}{n \cdot \beta_{n}}, \mathcal{F}^{(J_{n})}, x_{1}^{n}\right)\right) + 1\right)}{n}$$

$$+ 2 \int |g_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) + 2 \cdot c_{23} \cdot \frac{(M_{n} + 1)^{d}}{n},$$

wobei wir bei der letzten Gleichheit verwendet haben, dass der letzte Summand deterministisch ist. Zudem wissen wir, dass c_{23} unabhängig von n ist und n>1, da wir n hinreichend groß wählen. Als nächstes überprüfen wir die Voraussetzungen von Lemma 1.12 um damit dann die letzte Gleichung weiter abzuschätzen. Nach Voraussetzung ist $\beta_n = c_6 \cdot \log(n)$ und $a_n = (\log n)^{1/(6(N+d))}$. Damit ist $a_n > 0$ für hinreichend großes n. Nach Voraussetzung ist zudem $d, N, J_n \in \mathbb{N}$ und es gilt nach (3.1)

$$J_n \leq (M_n+1)^d \cdot (N+1)^d \leq n^{c_{14}}$$

für hinreichend großes n. Wir betrachten hier den logistischen squasher welcher nach Lemma 1.4 insbesondere 2-zulässig nach Definition 1.3 ist. Da die hier betrachtete Menge von Funktionen $\mathscr{F}^{(J_n)}$ identisch mit der aus Lemma 1.12 ist, sind nun alle Voraussetzungen erfüllt. Da wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen haben, dass $supp(X) \subseteq [-a_n, a_n]^d$ ist, erhalten wir mit Lemma 1.12 für hinreichend großes n:

$$\frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(\log\left(\sup_{x_{1}^{n} \in (supp(X))^{n}} \mathcal{N}_{1}\left(\frac{1}{n \cdot \beta_{n}}, \mathcal{F}^{(J_{n})}, x_{1}^{n}\right)\right) + 1\right)}{n} \\
\leq \frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(\left(c_{19} \cdot \log(n) \cdot (M_{n} + 1)^{d} \cdot (N + 1)^{d}\right) + 1\right)}{n} \\
\leq \frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(2 \cdot c_{19} \cdot \log(n) \cdot (M_{n} + 1)^{d} \cdot (N + 1)^{d}\right)}{n} \\
\leq c_{24} \cdot \frac{\log(n)^{3} \cdot (M_{n} + 1)^{d} \cdot (N + 1)^{d}}{n}.$$
(3.12)

Sei

$$P_{n}(x) = \sum_{k=1}^{(M_{n}+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1},\dots,j_{d} \in \{0,\dots,q\}\\j_{1}+\dots+j_{d} \leq q}} \frac{1}{j_{1}!\dots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1}+\dots+j_{d}}m}{\partial^{j_{1}}x^{(1)}\dots\partial^{j_{d}}x^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}})$$
$$\cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}}\dots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}} \cdot \prod_{j=1}^{d} (1 - \frac{M_{n}}{2a_{n}} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(j)}|)_{+}.$$

Für zwei beliebige reelle Zahlen $u, v \in \mathbb{R}$ gilt durch $0 \le (u - v)^2 = u^2 + v^2 - 2uv$:

$$v^2 + v^2 > 2uv$$

und zusammen mit einer Nulladdition, der Linearität des Integrals und der Supremumseigenschaft erhalten wir:

$$\int |g_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)
= \int |g_{n}(x) - P_{n}(x) + P_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)
= \int |g_{n}(x) - P_{n}(x)|^{2} + 2(g_{n} - P_{n}(x))(P_{n}(x) - m(x)) + |P_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)
\leq \int 2|g_{n}(x) - P_{n}(x)|^{2} + 2|P_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)
= 2 \int \sup_{x \in [-a_{n}, a_{n}]^{d}} |g_{n}(x) - P_{n}(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx) + 2 \int \sup_{x \in [-a_{n}, a_{n}]^{d}} |P_{n}(x) - m(x)|^{2} \mathbb{P}_{X}(dx)
= 2 \sup_{x \in [-a_{n}, a_{n}]^{d}} |g_{n}(x) - P_{n}(x)|^{2} + 2 \sup_{x \in [-a_{n}, a_{n}]^{d}} |P_{n}(x) - m(x)|^{2}, \tag{3.13}$$

wobei wir im letzten Schritt $supp(X)\subseteq [-a_n,a_n]^d$ und $\mathbb{P}(X\in supp(\mathbb{P}_X))=1$ verwendet haben. Um die letzten beiden Summanden weiterhin abzuschätzen möchten wir Lemma 1.10 anwenden. Dafür überprüfen wir ob dafür alle Voraussetzungen erfüllt sind. Wir betrachten den logistischen squasher, welcher nach Lemma 1.7 insbesondere 2-zulässig ist. Zudem ist für hinreichend großes n die Bedingung für n0 erfüllt und da unser neuronales Netz (??) mit n1 mit n2 identisch mit der Definition aus Lemma 1.10 ist, sind alle Voraussetzungen erfüllt. Wir erhalten damit für n3 und n4 hinreichend groß:

$$|g_{n}(x) - P_{n}(x)|$$

$$= \left| \sum_{k=1}^{(M_{n}+1)^{d}} \sum_{\substack{j_{1}, \dots, j_{d} \in \{0, \dots, q\} \\ j_{1} + \dots + j_{d} \leq q}} \frac{1}{j_{1}! \cdots j_{d}!} \cdot \frac{\partial^{j_{1} + \dots + j_{d}} m}{\partial^{j_{1}} x^{(1)} \cdots \partial^{j_{d}} x^{(d)}} (x_{\mathbf{i}_{k}}) \right|$$

$$\cdot \left| f_{net, j_{1}, \dots, j_{d}, \mathbf{i}_{k}}(x) - (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}} \cdot \prod_{j=1}^{d} (1 - \frac{M_{n}}{2a_{n}} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(j)}|)_{+} \right|$$

$$\leq (M_{n} + 1)^{d} \cdot (q + 1)^{d} \cdot e$$

$$\cdot \left| f_{net, j_{1}, \dots, j_{d}, \mathbf{i}_{k}}(x) - (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(1)})^{j_{1}} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(d)})^{j_{d}} \cdot \prod_{j=1}^{d} (1 - \frac{M_{n}}{2a_{n}} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_{k}}^{(j)}|)_{+} \right|$$

$$\leq (M_{n} + 1)^{d} \cdot (q + 1)^{d} \cdot e \cdot \hat{c}_{12} \cdot 3^{3 \cdot 3^{s}} \cdot a_{n}^{3 \cdot 2^{s}} \cdot M_{n}^{3} \cdot \frac{1}{R_{n}}$$

$$\leq (M_{n} + 1)^{d} \cdot (q + 1)^{d} \cdot c_{25} \cdot \log(n) \cdot \frac{M_{n}^{3}}{R_{n}}$$

$$= (M_{n} + 1)^{d} \cdot (q + 1)^{d} \cdot c_{25} \cdot \log(n) \cdot \frac{M_{n}^{3}}{R_{n}},$$

wobei wir unter anderem verwendet haben, dass für hinreichend großes n:

$$a_n^{2^{\lceil \log_2(N+d) \rceil}} \le a_n^{2^{\log_2(N+d)+1}} = a_n^{(N+d)\cdot 2},$$

gilt. Im letzten Schritt haben wir dann noch die Definition von a_n eingesetzt. Da nach Konstruktion a > 0, m(p,C)-glatt und $P_n(x)$ nach Lemma 2.1 eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen von m ist, erhalten wir mit Lemma 2.2:

$$|P_n(x) - m(x)| \le c_{26} \cdot \frac{a_n^p}{M_n^p} \le c_{26} \cdot \log(n) \cdot \frac{1}{M_n^p},$$
 (3.15)

wobei wir verwendet haben, dass für p = q + s für hinreichend großes n gilt:

$$a_n^p = a_n^{q+s} \le a_n^{N+d} \le a_n^{6 \cdot (N+d)} = \log(n),$$

da nach Voraussetzung $N \ge q$ und $d \ge s$ mit $s \in (0,1]$ ist. Durch Quadrieren bleiben die Ungleichungen auch erhalten und da die rechten Seiten von Ungleichung (3.14) und (3.15) nicht von x abhängen, gelten die Ungleichung ebenfalls für das Supremum. Durch einsetzen der Definitionen von M_n und R_n erhalten wir für n hinreichend groß:

$$\sup_{x \in [-a_n, a_n]^d} |g_n(x) - P_n(x)|^2 \le \left((M_n + 1)^d \cdot (q + 1)^d \cdot c_{25} \cdot \log(n) \cdot \frac{M_n^3}{R_n} \right)^2$$

$$\le c_{25}^2 \cdot (M_n + 1)^{2d} \cdot \log(n)^2 \cdot \frac{M_n^6}{R_n^2}$$

$$\le c_{25}^2 \cdot (M_n + 1)^{2d} \cdot \log(n)^2 \cdot \frac{(M_n + 1)^{6d}}{R_n^2}$$

$$\le c_{25}^2 \cdot \log(n)^2 \cdot \frac{(M_n + 1)^{8d}}{R_n^2}$$

$$\le c_{25}^2 \cdot \frac{n^{\frac{8d}{2p+d}}}{n^{2d+8}} \cdot \log(n)^2$$

$$= c_{25}^2 \cdot n^{\frac{8d}{2p+d} - 2d - 8} \cdot \log(n)^2$$

$$\le c_{25}^2 \cdot n^{\frac{8d}{2p+d} - 8 \cdot \frac{2p+d}{2p+d}} \cdot \log(n)^2$$

$$\le c_{25}^2 \cdot n^{-\frac{16p}{2p+d}} \cdot \log(n)^2$$

$$= c_{25}^2 \cdot n^{-\frac{16p}{2p+d}} \cdot \log(n)^2$$

$$\le c_{25}^2 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}} \cdot \log(n)^3$$

$$\le c_{25}^2 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}} \cdot \log(n)^3$$

wobei wir bei der letzten Ungleichung verwendet haben, dass $\frac{16p}{2p+d} > \frac{2p}{2p+d}$, da p > 0 ist und $\log(n)^2 < \log(n)^3$ für n hinreichend groß. Ebenfalls erhalten wir:

$$\sup_{x \in [-a_n, a_n]^d} |P_n(x) - m(x)|^2 \le \left(c_{26} \cdot \log(n) \cdot \frac{1}{M_n^p}\right)^2$$

$$\le c_{26}^2 \cdot \log(n)^2 \cdot c_5^{-2p} \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}}$$

$$\le \left(c_{16}^2 \cdot c_5^{-2p}\right) \cdot \log(n)^3 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}}.$$
(3.17)

Mit analogem Vorgehen erhalten wir für (3.12):

$$\frac{c_{23} \cdot \log(n)^{2} \cdot \left(\log\left(\sup_{X_{1}^{n} \in (supp(X))^{n}} \mathcal{N}_{1}\left(\frac{1}{n \cdot \beta_{n}}, \mathcal{F}^{(J_{n})}, x_{1}^{n}\right)\right) + 1\right)}{n} \\
\leq c_{24} \cdot \frac{\log(n)^{3} \cdot (M_{n} + 1)^{d} \cdot (N + 1)^{d}}{n} \\
\leq \hat{c}_{24} \cdot \log(n)^{3} \cdot \frac{(c_{5} \cdot n^{\frac{1}{2p+d}} + 2)^{d}}{n} \\
\leq \hat{c}_{24} \cdot \log(n)^{3} \cdot \frac{c_{5}^{d} \cdot n^{\frac{d}{2p+d}}}{n} \\
= \tilde{c}_{24} \cdot \log(n)^{3} \cdot n^{\frac{d}{2p+d} - 1} \\
= \tilde{c}_{24} \cdot \log(n)^{3} \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}}.$$
(3.18)

Zudem erhalten wir, da für n hinreichend groß $\log(n)^3 > 1$ gilt, mit analogem Vorgehen:

$$c_{23} \cdot \frac{(M_n + 1)^d}{n} \le \tilde{c}_{23} \cdot \frac{n^{\frac{d}{2p+d}}}{n}$$

$$\le \tilde{c}_{23} \cdot \log(n)^3 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}}$$
(3.19)

und

$$\frac{4 \cdot c_{22} \cdot \beta_n^2}{n} \le \tilde{c}_{22} \cdot \log(n)^3 \cdot n^{-1}
\le \tilde{c}_{22} \cdot \log(n)^3 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}}.$$
(3.20)

Nun haben wir alle Summanden von (3.8) abgeschätzt und erhalten schließlich mit mit (3.14) - (3.20):

$$\mathbb{E}\int |m_n(x)-m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \leq c_{fin} \cdot \log(n)^3 \cdot n^{-\frac{2p}{2p+d}},$$

mit

$$c_{fin} = \tilde{c}_{22} + 2 \cdot \tilde{c}_{23} + \tilde{c}_{24} + 2 \cdot (2 \cdot c_{16}^2 \cdot c_5^{-2p} + 2 \cdot c_{25}^2),$$

wobei c_{fin} als Summe nichtnegativer oder positiver Konstanten, die unabhängig von n sind, nichtnegativ und unabhängig von n ist. Damit haben wir unser Hauptresultat bewiesen.

Kapitel 4

Anwendungsbeispiel auf simulierte Daten

In diesem Kapitel betrachten wir die Leistung des hier vorgestellten neuronale Netze Regressionsschätzers bei endlicher Stichprobengröße auf simulierte Daten in *Python*. Die simulierten Daten welchen wir verwenden werden, sehen wie gefolgt aus: Wir wählen X gleichverteilt auf $[-2,2]^d$, wobei d die Dimension des Inputs ist, zudem wählen wir ε als standardnormalverteilt und unabhängig von X und wir definieren Y durch:

$$Y = m_j(X) + \sigma \cdot \lambda_j \cdot \varepsilon,$$

mit m_j : $[-2,2]^d \to \mathbb{R}$ $(j \in \{1,2\})$ wie unten definiert, $\lambda_j > 0$ als Skalierungsfaktor welcher wie unten definiert wird und einen Rauschfaktor $\sigma = 0.05$. Als Regressionsfunktionen verwenden wir die Funktionen:

$$m_1(x) = \sin(0.2 \cdot x^2) + \exp(0.5 \cdot x) + x^3$$

und

$$m_2(x_0,x_1) = \sin\left(\sqrt[2]{x_0^2 + x_1^2}\right).$$

Wir wählen λ_j als Interquartilsabstand einer Stichprobe von m(X) der Größe n = 8000. Mit diesen Daten lässt sich nun auch Y darstellen.

Um die Leistung unseres neuronalen Netze Regressionsschätzers zu überprüfen, haben wir erstmals m_1 und m_2 und die jeweilige Schätzung durch unseren neuronale Netze Regressionsschätzer zeichnen lassen. Man erkennt dass der Schätzer eine sehr gute Approximation der Funktion liefert, aber um genauer beurteilen zu können wie gut die Schätzung wirklich ist und wie gut unser Schätzer im Vergleich zu anderen Schätzern abschneidet betrachten wir in Tabelle ... den Interquartilsabstand und den Median der skalierten L_2 -Fehler der einzelnen Schätzer.

Unser vorgehen zum Vergleich der drei hier betrachteten Regressionsschätzern gestaltet sich wie gefolgt: Wir bestimmen erst den L2-Fehler der einzelnen Schätzer approximativ durch den empirisch arithmetischen L_2 -Fehler $\varepsilon_{L_2,N}$ auf einer unabhängigen Stichprobe von X der Größe N = 10000. Da wir unsere Regressionsfunktionen kennen und der Fehler stark vom Verhalten der korrekten Funktion von m_i abhängt, betrachten wir den empirischen L_2 -Fehler im Verhältnis zum einfachsten Schätzer von m_i , einer komplett konstanten Funktion. Der Wert dieses konstanten Schätzers bestimmen wir in dem wir das empirische Mittel der beobachtete Daten Y nehmen. Wir erhalten damit einen skaliertes Fehlermaß $\varepsilon_{L_2,N}(m_{n,i})/\bar{\varepsilon}_{L_2,N}(avg)$ mit $\bar{\varepsilon}_{L_2,N}(avg)$ als Median von 50 unabhängigen Realisierungen von $\varepsilon_{L_2,N}$. Wir bestimmten $\varepsilon_{L_2,N}(\cdot)$ als empirisches Mittel von 25 quadratischen Fehlern der Schätzung des konstanten Schätzers. Dieses skalierte Fehlermaß ist so zu deuten, dass ein großer Fehler durch einen der drei Regressionsschätzer im Falle dass der Fehler des konstanten Schätzers klein ist, auf eine noch schlechtere Performance hindeutet. Der Fehler $\varepsilon_{L_2,N}(m_{n,i})$ wird also durch $\bar{\varepsilon}_{L_2,N}(avg)$ gewichtet. Die resultierenden skalierten Fehler hängen noch von der Stichprobe von (X,Y) ab und um diese Werte besser vergleichen zu können, führen wir die Fehlerberechnung jeweils 50 mal durch und geben dann den Median und Interquartilsabstand für die Schätzung der betrachteten Regressionsschätzer aus. Wir teilen für jeden Schätzer die Stichprobe auf in einlearning sample der Größe $n_l = 0.8 \cdot n$ und in ein testing sample der Größe $n_t = 0.2 \cdot n$. Wir bestimmen den Schätzer für alle Parameterwerte mit dem learning sample und bestimmen das korrespondiere L_2 -Risiko auf dem testing sample und wählen dann die Parameter die zu einem minimalen empirischen L_2 -Risiko auf dem testing sample führen. Unser erster Schätzer $fc_neural_l_estimate$ ist ein fully connected neuronales Netz mit einer verborgenen Schicht. Dieser Schätzer hat eine feste Anzahl an Neuronen die wir aus der Menge {5,10,25,50,75} auswählen die bei der Simulation zu einem minimalen empirischen L_2 -Risiko führt. Unser zweiter Schätzer nearest_neighbor_estimate ist ein Nächste-Nachbar Schätzer bei der die Anzahl an nächsten Nachbarn aus der Menge $\{1,2,3\} \cup \{4,8,12,16,\ldots,4 \cdot \lfloor \frac{n_l}{4} \rfloor \}$ ausgewählt wird. Unser letzter Schätzer new_neural_network_estimate ist unser hier vorgestelltes neuronale Netze Regressionsschätzer. Hier haben wir die Parameter je nachdem welche Regressionsfunktion wir betrachtet haben entsprechend angepasst. EKLÄR WORAN MAN DAS SIEHT ZUM BEISPIEL GRAD DES POLYNOMS WELCHES WIR SCHÄTZEN... Wie wir in den Tabellen anhand des skalierten L_2 -Fehlers sehen können, übertrifft unserer

Wie wir in den Tabellen anhand des skalierten L_2 -Fehlers sehen können, übertrifft unserer neuronale Netze Schätzer in allen Fällen die Leistung der anderen Schätzer.

	m_1		m_2	
noise	5%	10%	5%	10%
$\bar{\varepsilon}_{L_2,N}(avg)$				
approach	Median	Median	Median	Median
	(IQR)	(IQR)	(IQR)	(IQR)
new_neural_network_estimate	Afghanistan	AF	AFG	004
fc_neural_1_estimate	Aland	AX	ALA	248
nearest_neighbor_estimate	Albania	AL	ALB	008

Tabelle 4.1: Truth Tables and Accuracy Measures for each modeling library.

Literaturverzeichnis

- [AB19] A. Braun, M. Kohler und A. Krzyzak: Analysis of the rate of convergence of neural network regression estimates which are easy to implement. 2019.
- [AHM09] ALBRECHER H., BINDER, A. und P. MAYER: *Einführung in die Finanzmathematik*. Birkhäuser, Basel, 2009.
- [Car96] CARRIERE, J.: Valuation of the early-exercise price for options using simulations and nonparametric regression. Insurance: mathematics and Economics, 19(1):19–30, 1996.
- [EKT⁺07] EGLOFF, D., M. KOHLER, N. TODOROVIC et al.: *A dynamic look-ahead Monte Carlo algorithm for pricing Bermudan options*. The Annals of Applied Probability, 17(4):1138–1171, 2007.
- [For16] FORSTER, O.: Analysis 1 Differential- und Integralrechnung einer Veränderlichen. Springer, Berlin, 2016.
- [Gla13] GLASSERMAN, P.: Monte Carlo methods in financial engineering, Band 53 der Reihe Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer, New York, 2013.
- [Hill3] HILDEBRANDT, S.: Analysis 2. Springer, Berlin, 2013.
- [Kle13] KLENKE, A.: Wahrscheinlichkeitstheorie. Springer, Berlin, 2013.
- [Koh10] Kohler, M.: A review on regression-based Monte Carlo methods for pricing American options. In: Devroye L., Karasözen, B. Kohler M. und R. Korn (Herausgeber): Recent Developments in Applied Probability and Statistics, Seiten 37–58. Physica, Heidelberg, 2010.

- [KS98] KARATZAS, I. und S. SHREVE: Methods of mathematical finance, Band 39 der Reihe Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer, New York, 1998.
- [LS01] LONGSTAFF, F. und E. SCHWARTZ: Valuing American options by simulation: a simple least-squares approach. The review of financial studies, 14(1):113–147, 2001.
- [Mal00] MALKIEL, B.: Börsenerfolg ist kein Zufall die besten Investmentstrategien für das neue Jahrtausend. FinanzBuch, München, 2000.
- [R D17] R DEVELOPMENT CORE TEAM: R: A Language and Environment for Statistical Computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2017.
- [SB07] STOER, J. und R. BULIRSCH: *Numerische Mathematik 1*. Springer, Berlin, 2007.
- [Sto18] STORCH, U. UND WIEBE, H: Grundkonzepte der Mathematik Mengentheoretische, algebraische, topologische Grundlagen sowie reelle und komplexe Zahlen. Springer, Berlin, 2018.
- [TVR99] TSITSIKLIS, J. N. und B. VAN ROY: Optimal stopping of Markov processes: Hilbert space theory, approximation algorithms, and an application to pricing high-dimensional financial derivatives. IEEE Transactions on Automatic Control, 44(10):1840–1851, 1999.

Appendix

Der Programmcode ist wie folgt aufgebaut:

- main.py ist das Hauptprogramm welches alle Schätzer aufruft und die Ouputs generiert.
- data_gen.py generiert die Daten die wir für unsere Simulation benötigen.
- help_neural_networks.py fasst alle Hilfsfunktion zusammen.
- new_neural_network.py enthält unseren Neuronale-Netze-Regressionsschätzer.
- fc_neural_network.py enthält das fully connected neuronale Netz mit einer verborgenen Schicht.
- nearest_neighbor.py enthält einen Nächste-Nachbar Schätzer.
- constant.py enthält den konstanten Schätzer.

Listing 4.1: main.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf -8 -*-
4 Created on Wed Oct 23 15:08:26 2019
6 @author: adrian
8 Main Datei die die Simulation und damit den Vergleich der implementierten Schätzer
9 durchführt.
10 ""
11 import numpy as np
12 from mpl_toolkits import mplot3d
13 import matplotlib . pyplot as plt
14 import pandas as pd
15 import tikzplotlib
16 from scipy.stats import iqr
17 from data_gen import gen_data_Y
18 from constant import constant_estimate
19 from new_neural_network import new_neural_network_estimate
20 from nearest_neighbor import nearest_neighbor_estimate
21 from fc_neural_network import fc_neural_1_estimate
23 \quad n = 10000
24 \quad n\_train = n * 0.8
25 \quad n_t est = n * 0.2
```

```
27 \text{ sigma} = 0.05
29 ,,,
30 EINDIMENSIONALER FALL (d = 1) wird geplottet
31 ,,,
32 N = 3
33 \ q = 2
34 R = 10 ** 6
35 \ a = 2
36 M = 2
37 d = 1
38
39 \# sigma = 0.05
40
41 \ \#n_train = 100
42 \ \#n_t est = 2000
43 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
44 X_train = np.random.uniform(low=-2,high=2, size=(int(n_train),d))
45 \text{ m\_X\_train}, Y\_\text{train} = \text{gen\_data\_Y}(X\_\text{train}, \text{sigma})
47 X_test = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d))
49\ Y\_pred\_new\_nn = new\_neural\_network\_estimate(X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test \ , \ N, \ q \ , \ R, \ d \ , M, \ a \ ,)
50\ \#Y\_pred\_fc\_nn\_1\ =\ fc\_neural\_1\_estimate\left(X\_train\ ,\ Y\_train\ ,\ X\_test\ \right)
51 \ \ \texttt{\#Y\_pred\_nearest\_neighbor} = \ \texttt{nearest\_neighbor\_estimate} (X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test \ )
52 \text{ m\_X\_test}, dummy = gen\_data\_Y(X\_test, sigma)
55 \ \ \#plt.plot(X\_test \ , \ Y\_pred\_nearest\_neighbor \ , \ '-r' \ , \ label='nearest\_neighbor')
56 \ \#plt.plot(X\_test \ , \ Y\_pred\_fc\_nn\_1 \ , \ '-g' \ , \ label='fc\_nn\_1')
57 \# colors = (0,0,0)
58 area = 4
59 \quad plt.scatter(X\_test\ ,\ m\_X\_test\ ,\ s=area\ ,\ color\ =\ 'blue'\ ,\ label='m\_1'\ ,\ alpha=0.5)
60 plt.scatter(X_test, Y_pred_new_nn, s=area, color = 'red', label='new_neural_network_estimate', alpha=0.5)
61 plt.title('...')
62 plt.legend(loc='upper left')
63 plt.xlabel('x')
64 plt.ylabel('y')
65 #plt.savefig('graph_d_1.png')
66 tikzplotlib.save("mytikz_d1.tex")
67 # plt.show()
68 #plt.plot(X_test, Y_pred_new_nn, 'ro-', label='new_nn')
69 \# plt.plot(X_{test}, m_X_{test}, '-b', label='m_d')
71 #plt.xlim(-2, 2)
72 # plt . x lim(-2,2)
73 #plt.show()
75
76 ,,,
77 ZEIDIMENSIONALER FALL (d = 2) wird geplottet
78 ,,
79 N = 2
80 \ q = 2
81 \mathbf{R} = 10 ** 6
82 \ a = 2
83 M = 2
84 \ d = 2
85
86 \text{ \#sigma} = 0.05
87
88 \ \#n\_train = 100
89 \ \#n_test = 2000
90 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
91 X_{train} = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_train),d))
92 m_X_train, Y_train = gen_data_Y(X_train, sigma)
94 X_{test} = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d))
95
96 \ Y\_pred\_new\_nn = new\_neural\_network\_estimate (X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test \ , \ N, \ q \ , \ R, \ d \ , M, \ a \ ,)
97 \#Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train, Y_train, X_test)
98 #Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train, Y_train, X_test)
99 m_X_test , dummy = gen_data_Y(X_test , sigma)
100
101
```

```
102
103 x = np.ravel(X_test[:,0])
104 y = np.ravel(X_test[:,1])
105
106 # so wie es sein soll
107 \ \ \text{#z} = m_X_t est[:,0]
108 # was der SChätzer auswirft
109 z_new = Y_pred_new_nn[:,0]
111 ax = plt.axes(projection='3d')
112 ax.scatter(x, y, z_new, c=z_new, cmap='viridis', linewidth=0.5);
113 ax.view_init(40, 20)
114 plt.savefig('graph_d_2_new_estimate.png')
115
116 # so wie es sein soll
117 z = m_X_t est[:,0]
118 # was der Schätzer auswirft
120 ax = plt.axes(projection='3d')
121 ax.scatter(x, y, z, c=z, cmap='viridis', linewidth=0.5);
122 ax. view init (40, 20)
123 plt.savefig('test.png')
124 #tikzplotlib.save("mytikz_d2.tex")
125
126 \ \ postpro = np. \, asarray \, ([\ X\_test[:,0]\,,\ X\_test[:,1]\,,\ Y\_pred\_new\_nn[:,0]\ ])
127 np.savetxt("plotpostpro.csv", np.transpose(postpro), delimiter=",")
129  #plt.savefig('graph_d_2_m_2.png')
130
131 ,,,
132 ein Vergleich des emp. L2 Fehler gemacht für d = 1
133
134 \ \#n_train = 100
135 \ \#n_t est = 2000
136 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
137
138 N = 3
139 q = 2
140 R = 10 ** 6
141 \ a = 2
142 M = 2
143 d = 1
144
145 \text{ #sigma} = 0.05
146
148 scaled_error[:] = np.nan
150 e_L2_avg = np.zeros(5)
151 \quad e_L L 2\_a v g \ [:] \ = \ n p \cdot n a n
152
153 for i in range(0,50,1):
154
155
        X\_train = np.random.uniform(low=-2, high=2, size=(int(n\_train), d))
156
        m\_X\_train \ , \ Y\_train \ = \ gen\_data\_Y(X\_train \ , sigma)
157
158
        X_{test} = np.random.uniform(low=-2, high=2, size=(int(n_{test}), d))
159
160
        #Y_pred_constant = constant_estimate(Y_train)
161
        Y\_pred\_new\_nn \ = \ new\_neural\_network\_estimate (X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test \ , \ N, \ q \ , \ R, \ d \ , \ M, \ a \ ,)
162
        Y\_pred\_fc\_nn\_1 \ = \ fc\_neural\_1\_estimate\left(X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test \right)
163
        Y\_pred\_nearest\_neighbor = nearest\_neighbor\_estimate(X\_train \ , \ Y\_train \ , \ X\_test)
164
165
        m_X_{test}, not_{needed} = gen_{data_Y(X_{test}, sigma)}
167
        e_L2_new_nn = np.mean(abs(Y_pred_new_nn - m_X_test) ** 2)
168
        e_L2_fc_nn_1 = np.mean(abs(Y_pred_fc_nn_1 - m_X_test) ** 2)
        e_L2_nearest_neighbor = np.mean(abs(Y_pred_nearest_neighbor - m_X_test) ** 2)
169
170
         for j in range(0,25,1):
171
173
             X = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(n_test,d))
174
             m_X, Y = gen_data_Y(X, sigma)
175
             Y_pred_constant = constant_estimate(Y)
176
```

```
177
                              e_L2_avg[j] = np.mean(abs(Y_pred_constant - m_X) ** 2)
178
179
                    scaled error[i,0] = e L2 new nn / np.median(e L2 avg)
180
                    scaled_error[i,1] = e_L2_fc_nn_1 / np.median(e_L2_avg)
                    scaled_error[i,2] = e_L2_nearest_neighbor / np.median(e_L2_avg)
181
182
183 iqr_new_nn = iqr(scaled_error[:,0])
 184 iqr_fc_nn_1 = iqr(scaled_error[:,1])
185 iqr_nearest_neighbor = iqr(scaled_error[:,2])
186
187 median_new_nn = np.median(scaled_error[:,0])
188 median fc nn 1 = np. median(scaled error[:.1])
189 median nearest neighbor = np. median(scaled error[:,2])
190
191 rows = ["noise", "e_L2_avg", "approach", "new_nn", "fc_nn_1", "nearest_neighbor"]
192
193 series_noise_1 = pd. Series([repr(sigma)+'%',np.median(e_L2_avg),"(Median, IQR)",(median_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, 
                      fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
 194 series_noise_1.name = "
195 #series_noise_2 = pd. Series([repr(sigma)+'%',np.median(e_L2_avg),"(Median, IQR)",(median_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, iqr_new_n
                        \_fc\_nn\_1, \ iqr\_fc\_nn\_1), \ (median\_nearest\_neighbor, \ iqr\_nearest\_neighbor)], \ index=rows)
196 #series_noise_2.name = ""
197
198 error_df = pd.concat([series_noise_1], axis=1)
 199 #print(error_df)
200 error_df.to_csv('out_d_1.csv',index = True)
201
202 ,,,
203 ein Vergleich des emp. L2 Fehler gemacht für d = 2
204 ''
205 \, n_{train} = 100
206 \, n_t est = 200
207 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
208
209 N = 2
210 \ q = 2
211 R = 10 ** 6
212 \ a = 2
213 \text{ M} = 2
214 d = 2
215
216 \text{ sigma} = 0.1
217
218 \text{ scaled\_error} = \text{np.empty}((5, 3,))
219 scaled_error[:] = np.nan
220
221 e_L2_avg = np.zeros(5)
222 e_L2_avg[:] = np.nan
223
224 for i in range (0.5.1):
225
226
                    X_{train} = np.random.uniform(low=-2, high=2, size=(int(n_train), d))
227
                    m_X_{train}, Y_{train} = gen_{data}Y(X_{train}, sigma)
228
 229
                    X_{test} = np.random.uniform(low=-2, high=2, size=(int(n_{test}), d))
230
                    #Y_pred_constant = constant_estimate(Y_train)
232
                    Y_pred_new_nn = new_neural_network_estimate(X_train, Y_train, X_test, N, q, R, d, M, a,)
233
                    Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train, Y_train, X_test)
234
                   Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train, Y_train, X_test)
235
236
                   m_X_{test}, not_{needed} = gen_data_Y(X_{test}, sigma)
237
238
                    e_L2_new_nn = np.mean(abs(Y_pred_new_nn - m_X_test) ** 2)
 239
                    e_L2_fc_nn_1 = np.mean(abs(Y_pred_fc_nn_1 - m_X_test) ** 2)
 240
                    e_L2_nearest_neighbor = np.mean(abs(Y_pred_nearest_neighbor - m_X_test) ** 2)
241
242
                    for j in range (0,5,1):
243
244
                              X = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(n_test,d))
245
                              m_X, Y = gen_data_Y(X, sigma)
246
                              Y_pred_constant = constant_estimate(Y)
247
 248
                               e_L2_avg[j] = np.mean(abs(Y_pred_constant - m_X) ** 2)
 249
```

```
250
                                    scaled_error[i,0] = e_L2_new_nn / np.median(e_L2_avg)
251
                                    scaled_error[i,1] = e_L2_fc_nn_1 / np.median(e_L2_avg)
252
                                    scaled\_error[i,2] = e_L2\_nearest\_neighbor / np.median(e_L2\_avg)
253
254 iqr_new_nn = iqr(scaled_error[:,0])
255 iqr_fc_nn_1 = iqr(scaled_error[:,1])
256 iqr_nearest_neighbor = iqr(scaled_error[:,2])
258 median_new_nn = np.median(scaled_error[:,0])
259 median_fc_nn_1 = np.median(scaled_error[:,1])
260 median_nearest_neighbor = np.median(scaled_error[:,2])
261
262 rows = ["noise","e_L2_avg","approach","new_nn", "fc_nn_1", "nearest_neighbor"]
263
264 \quad series\_noise\_1 = pd. \\ Series([repr(sigma)+'\%', np.median(e\_L2\_avg), "(Median, IQR)", (median\_new\_nn, iqr\_new\_nn), (median\_new\_nn, iqr_new\_nn), (median\_new\_nn, iqr_new\_nn), (median\_new\_nn, iqr_new\_nn), (median\_new\_nn, iqr_new\_nn, iqr_new\_nn), (median\_new\_nn, iqr_new\_nn, iqr
                                       fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
265 series_noise_1.name = "
266 #series_noise_2 = pd. Series([repr(sigma)+'%',np.median(e_L2_avg),"(Median, IQR)",(median_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, iqr_new_nn), (median_new_nn, iqr_new_nn, 
                                         _fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
267 #series_noise_2.name = ""
268
269 error_df = pd.concat([series_noise_1], axis=1)
270 #print(error df)
271 error_df.to_csv('out_d_2.csv',index = True)
```

Listing 4.2: data_gen.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
 2 # -*- coding: utf-8 -*-
4 Created on Fri Oct 11 12:01:42 2019
6 @author: adrian
8 Generieren der Daten die wir für einen Vergleich von Regressionsschätzern benötigen
10 # Wir wählen x gleichverteilt auf [-2,2]^d, wobei d die dimension des Inputs ist
11 # n is die Größe der Stichprobe
13 import numpy as np
14 from scipy.stats import iqr
15
16 # Regressionsfunktionen
17 #
18 # x: Ein Vektor x der Dimension d
19 # d: Dimension des Vektors x
21 def m_d (x, d):
23
       pi = np.pi
24
       cos = np.cos
25
       sin = np.sin
26
       exp = np.exp
27
      if d == 1:
29
           return \sin(0.2 * x[0] ** 2) + \exp(0.5 * x[0]) + x[0] ** 3
31
       elif d == 2:
           return np. \sin(\text{np. sqrt}(x[0] ** 2 + x[1] ** 2))
32
33
34
           print("Your data has the wrong dimension!")
35
36
37 def error_limit (x, p, c, d):
38
           return c * (np.log(x) ** 3) * (x ** (-(2 * p)/(2 * p + d)))
40
41 # Generiert den Vektor Y_1, \dots, Y_n für den Datensatz (X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n)
42 #
43 # X: Input<br/>daten der Form (X_1,\ldots,X_n), wobei X_i \in \mathbb{R}^d für i=1,\ldots,n
44 # sigma: Schwankung in den Werten (Noise) \in \{0.05,0.1\}
45
46 def gen_data_Y (X, sigma):
```

```
48
       n = np. size(X, 0)
49
       d = np. size(X, 1)
50
51
      m_X = np.zeros((n,1,))
52
       m_X[:] = np.nan
53
54
       S = np.random.standard\_normal(size=(n,1))
55
       for t in range (0,n):
          m_X[t] = m_d(X[t], d)
58
      Y = m_X + sigma * iqr(m_X) * S
       return (m_X, Y)
```

Listing 4.3: help_neural_networks.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-
4 Created on Tue Oct 15 11:22:02 2019
8 Implementation von Neuronalen-Netzen welche wir für die Konstruktion unseres
9 Neuronale-Netze-Regressionschätzers benötigen
10 ""
11 import numpy as np
12
13 # Sigmoidfunktion
15 # x: x \in \R
16
17 def sigmoid (x):
18
19
       return 1 / (1 + np.exp(-x))
20
21 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x) = x approximiert
22 #
24 # R: reelle Zahl >= 1
26 def f_id (x, R):
       return 4 * R * sigmoid(x / R) - 2 * R
28
29
30 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x, y) = x * y approximiert
31 #
32 # x: reelle Zahl
33 # y: reelle Zahl
34 # R: reelle Zahl >= 1
36 def f_{mult}(x, y, R):
37
38
        return \ (((R ** 2) \ / \ 4) \ * \ (((1 \ + \ np.exp(-1)) \ ** \ 3) \ / \ (np.exp(-2) \ - \ np.exp(-1)))) \ \backslash 
39
       * (sigmoid(((2 * (x + y)) / R) + 1) - 2 * sigmoid(((x + y) / R) + 1) 
40
      - \ sigmoid (((2 \ * \ (x \ - \ y)) \ / \ R) \ + \ 1) \ + \ 2 \ * \ sigmoid (((x \ - \ y) \ / \ R) \ + \ 1))
41
42 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x) = max(x,0) approximiert
43 #
44 # x: reelle Zahl
45 # R: reelle Zahl >= 1
46
47 def f_relu(x, R):
48
49
       return f_{mult}(f_{id}(x, R), sigmoid(R * x),R)
50
51 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x) = max(1 - (M/(2 * a)) * abs(x - y),0) approximiert
53 # x: reelle Zahl
54 # y: fixe reelle Zahl
55 # R: reelle Zahl >= 1
56 # M: fixe natürliche Zahl
57 # a: fixe Zahl > 0
59 def f_{hat}(x, y, R, M, a):
```

```
60
61 return f_relu((M / (2 * a)) * (x - y) + 1, R) - 2 * f_relu((M / (2 * a)) * (x - y), R) + 2 * f_relu((M / (2 * a)) * (x - y) - 1, R)
```

Listing 4.4: new_neural_network.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-
4 Created on Wed Oct 16 15:40:14 2019
6 @author: adrian
8 Um die Gewichte der Ausgabeschicht zu bestimmen lösen wir ein regularisiertes
9 Kleinste-Quadrate Problem.
10
11 """
12 import scipy.special
13 import numpy as np
14 import itertools
15 from help_neural_networks import f_id, f_mult, f_hat
16 import math
18 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x) = (x^{(1)} - x_i k^{(1)})^i + \dots *
20 #
21 # x: Eingabevektor für das Neuronale Netz x \in [-a,a]^d
22 # d: Ist die Dimension des Eingabevektors d > 0
23 # j_1_d: Ist ein d-dimensionaler Vektor j_1, \ldots, j_d \in \{0, 1, \ldots, N\}
24 # X_i: Ist eine d x (M+1)^d Matrix.
25 # N: Natürliche Zahl >= q
26 # q:
27 \# s: [log_2(N + d)]
28 # R: Zahl >= 1
29 # M: M \in N
30 # a: > 0
32 def f_{net}(x, d, j_1_d, X_i, N, q, s, R, M, a):
33 #initialize f_l_k
      \#(2 ** s) + 1
35
      \#((1 + M) ** d) + 1
      f_l_k = np.empty((s + 1, (2 ** s) + 1,))
36
37
      f_l_k[:] = np.nan
38
39
40
     for k in range(np.sum(j_1_d) + d + 1, (2 ** s) + 1, 1):
41
         f_1_k[s, k] = 1
43
      for k in range (1, d + 1, 1):
          f_1_k[s, np.sum(j_1_d) + k] = f_hat(x[k-1], X_i[k-1], R, M, a)
44
45
46
      for l in range (1, d + 1, 1):
47
          k = j_1d[range(0, 1 - 1, 1)].sum() + 1
48
          while k in range (j_1-d[range(0, 1-1, 1)].sum() + 1, j_1-d[range(0, 1, 1)].sum() + 1, 1):
49
              f_1_k[s, k] = f_id(f_id(x[l-1] - X_i[l-1], R), R)
50
52
      for 1 in range (s - 1, -1, -1):
          for k in range ((2 ** 1), 0, -1):
54
              f_{-1}k[1, k] = f_{-mult}(f_{-1}k[1 + 1, (2 * k) - 1], f_{-1}k[1 + 1, 2 * k], R)
55
     return f_1_k[0,1]
58 # Bestimmung der Gewichte der Ausgabeschicht durch lösen eines regularisierten
59 # Kleineste-Quadrate Problems
61 # X: Eingabevektoren der Form (X_1,...,X_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1),...,(X_n,Y_n)
62 # Y: Eingabevektoren der Form (Y_1,...,Y_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1),...,(X_n,Y_n)
63 # N: Natürliche Zahl >= q
64 # q:
65 # R: Zahl >= 1
66 # d: Ist die Dimension des Eingabevektors d > 0
67 # M: M \in \N
68 # a: >0
```

```
69
70 def output_weights(X, Y, N, q, R, d, M, a):
71
        s = math.ceil(math.log2(N + d))
72
73
 74
         \mbox{\# Anzahl der Eingabevektoren } X_{-}1\;, \ldots\;, X_{-}n \\
 75
 76
        n = np. size(X, 0)
 77
 78
        # Eine beliebige constante > 0
 79
 80
        \#c = 3 = np.random.randint(1.10)
81
        c 3 = 0.01
82
        # Anzahl der Spalten der Matrix für das Kleinste-Quadrate Problem
83
 84
        # In den Spalten sind die Funktionswerte von f_net eingespeichert
 85
        J = int(((1 + M) ** d) * scipy.special.binom(N + d, d))
 87
 88
        # Für die Konstruktion der Matrix brauchen wir erstmal alle Inputparameter
        # für f_net, da wir dort nur den Funktionswert für einen Vektor j_1,...,j_d einsetzen
89
        # müssen wir erstmals alle möglichen Vektoren dieser Art konstruieren die die Bedingung 0 <= j_1 + ... + j_d <= N
90
               erfüllen
91
        # X_ik hat in den Zeilen die Vektoren X_i aus dem Paper
92
93
        X_i = np.transpose(np.empty((d, (1 + M) ** d,)))
        X_i = np.nan
94
95
 96
        I_k = np.array(list(itertools.product(range(0, M + 1), repeat = d)))
        X_ik[:] = (I_k[:] * ((2 * a) / M)) - a
97
98
        all_j1_jd = np.array(list(itertools.product(range(0, N + 1), repeat = d)))
99
100
        all_j1_jd_by_cond = all_j1_jd[all_j1_jd.sum(axis=1) \le N]
101
102
        B = np.empty((n, J,))
103
        B[:] = np.nan
104
105
        for i in range (0, n):
106
            j = 0
107
             for k in range (0, ((M + 1) ** d)):
                  for \ z \ in \ range(0\,, \ int(scipy.special.binom(N+d,\ d))): \\
108
                     B[\,i\,\,,j\,\,] \ = \ f\_net\,(X[\,i\,\,]\,,\ d\,,\ a\,l\,l\,\,\_j\,l\,\,\_j\,d\,\,\_by\,\,\_cond\,[\,z\,\,]\,,\ X\_i\,k\,\,[\,k\,\,]\,,\ N,\ q\,,\ s\,,\ R,\ M,\ a\,)
109
110
                     j += 1
112
        transpose (B),Y))
113
        weights = np.linalg.solve(np.dot(np.transpose(B),B) + (c_3) * np.identity(J), np.dot(np.transpose(B),Y))
114
115
        return \ (weights \ , \ J \ , \ all \_j1 \_jd \_by \_cond \ , \ X\_ik)
116
117 # Bestimmung des Funktionswert des Neuronale-Netzte-Regressionsschätzers
118 #
119 # x: Eingabe für einen Vektor der Form [-a,a]^d für den eine Schätzung bestimmt werden soll
120 \text{ \# X: Eingabevektoren der Form } (X\_1,\ldots,X\_n) \text{ für das Neuronale Netz aus dem Datensatz } (X\_1,Y\_1),\ldots,(X\_n,Y\_n)
121 \ \# \ Y \colon \ Eingabevektoren \ der \ Form \ (Y\_1 \ , \dots \ , Y\_n) \ f\"{u}r \ das \ Neuronale \ Netz \ aus \ dem \ Datensatz \ (X\_1 \ , Y\_1) \ , \dots \ , (X\_n \ , Y\_n)
122 # N: Natürliche Zahl >= q
123 # q:
124 \# s: [log_2(N + d)]
125 # R: Zahl >= 1
126 # d: Ist die Dimension des Eingabevektors d > 0
127 # M: M \in \N
128 # a: >0
129
130 def new_neural_network_estimate(X_train, Y_train, X_test, N, q, R, d, M, a):
131
        Y_pred = np.empty((len(X_test), 1,))
133
        Y_pred[:] = np.nan
134
135
        s = math.ceil(math.log2(N + d))
136
        weights, J, all_jl_jd_by_cond, X_ik = output_weights(X_train, Y_train, N, q, R, d, M, a)
137
138
139
        F_net = np.empty((1, J,))
140
        F_net[:] = np.nan
141
```

```
142
         for u in range (0, len(X_test), 1):
              j = 0
143
144
              while j < J:
                   for k in range(0, ((M + 1) ** d)):
145
146
                         for \ z \ in \ range(0\,, \ int(scipy.special.binom(N+d,\ d))): \\
147
                             F_{-}net[0\,,j\,] \ = \ f_{-}net(X_{-}test[u\,],\ d\,,\ all_{-}j1_{-}jd_{-}by_{-}cond[z\,]\,,\ X_{-}ik[k\,]\,,\ N,\ q\,,\ s\,,\ R,\ M,\ a)
148
149
150
              Y_pred[u] = np.sum(np.transpose(weights) * F_net)
151
152
         return Y pred
```

Listing 4.5: fc_neural_network.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
 2 # -*- coding: utf-8 -*-
 4 Created on Fri Oct 11 14:23:15 2019
 6 @author: adrian
 8 import numpy as np
 9 from keras.models import Sequential
10 from keras.layers import Dense
12 # Fully-Connected Neuronales Netzt mit einer Verborgenen schicht welches die
13 # Anzahl der Neuronen adaptiv , durch minimierung des L2 fehlers , aus der Menge \{5, 10, 25, 50, 75\} auswählt .
14 #
15 \ \# \ X: \ Eingabevektoren \ der \ Form \ (X_{-1}, \dots, X_{n}) \ f\"{u}r \ das \ Neuronale \ Netz \ aus \ dem \ Datensatz \ (X_{-1}, Y_{-1}) \ , \dots \ , (X_{-n}, Y_{-n}) \ , \dots \ , (X_
16 # Y: Eingabevektoren der Form (Y_1,...,Y_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1),...,(X_n,Y_n)
18 def fc_neural_1_estimate (X_train,Y_train,X_test):
                 Ynew = np.empty((len(X_{train}), len([5,10,25,50,75]),))
20
21
                Ynew[:] = np.nan
23
                count = 0
24
                n_neurons = [5, 10, 25, 50, 75]
25
                 d = np.size(X_train, 1)
27
                for j in n_neurons:
29
                           model = Sequential()
                           model.add(Dense(j, input_dim=d, activation='relu'))
30
                           model.add(Dense(1, activation='linear'))
31
                           model.compile(loss='mse', optimizer='adam')
32
33
                           \underline{model}.\;fit\;(X\_train\;,\;Y\_train\;,\;epochs\!=\!1000,\;verbose\!=\!0)
34
35
                           Ynew[:,count] = model.predict(X_train)[:,0]
36
                           count += 1
                 Diff = Ynew[:] - Y_train[:]
39
                 best_n_neurons = n_neurons[(1/len(X_train) *(Diff.sum(axis=0) ** 2)).argmin()]
40
41
                 model = Sequential()
42
                 model.add(Dense(best_n_neurons, input_dim=d, activation='relu'))
43
                 model.add(Dense(1, activation='linear'))
44
                 model.compile(loss='mse', optimizer='adam')
45
                 model.fit(X_train, Y_train, epochs=1000, verbose=1)
                 return model.predict(X_test)
```

Listing 4.6: nearest_neighbor.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf -8 -*-
3 """
4 Created on Fri Oct 11 11:14:47 2019
5
6 @author: adrian
7 K-Nearest-Neighbors Algorithm
8 """
```

```
10 # Generate sample data
11 import numpy as np
12 from sklearn import neighbors
13 from sklearn.model_selection import GridSearchCV
14 import warnings
16 warnings.simplefilter(action='ignore', category=FutureWarning)
17
18 # Implementierung des k-Nächste-Nachbarn-Algorithmus. Dieser bestimmt auch selber bei einer Liste von Anzahlen an
        Nachbarn die betrachtet werden
19 # sollen welches die beste Wahl ist.
20 #
21 # X: Inputvektor für das Kalibirieren des Modells
22 # Y: Inputvektor für das Kalibirieren des Modells (Zielvektor an den die Gewichte angepasst werden)
23 # T: Inputvektor für den eine Vorhersage bestimmte werden soll
25 def nearest_neighbor_estimate (X_train,Y_train,X_test):
       params = {'n_neighbors':[2,3,4,5,6,7,8,9], 'weights': ['uniform', 'distance']}
28
29
       knn = neighbors. KNeighborsRegressor()
30
       knn\_gridsearch\_model = GridSearchCV\,(knn\,,\ params\,,\ cv\!=\!5)
31
32
       knn\_gridsearch\_model.\ fit\ (X\_train\ ,Y\_train\ )
33
       return knn_gridsearch_model.predict(X_test)
```

Listing 4.7: constant.py

```
1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3 """
4 Created on Wed Oct 23 15:26:19 2019
5
6 @author: adrian
7 Constant Estimator
8 """
9 import numpy as np
10 from scipy import mean
11
12 # Gibt den Mittelwert der Funktionswerte einer Funktion als Schätzer zurück
13 #
14 # Y: Datensatz der Form (Y_1,...) wobei Y_i \in \R für i = 1,...
15
16 def constant_estimate(Y):
17 m = np.zeros((len(Y),1,))
18 m[:] = mean(Y)
19 return m
```