



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

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

Einleitung	6
1 Grundlagen und Hilfsresultate	7
1.1 Definitionen	8
1.2 Hilfsresultate	9
2 Konstruktion des Neuronale Netze Regressionsschätzers	19
2.1 Definition der Netzwerkarchitektur	20
2.2 Definition der Gewichte der Ausgabeschicht	26
3 Resultat zur Konvergenzgeschwindigkeit	28
4 Anwendungsbeispiel auf Simulierte Daten	33
Literaturverzeichnis	35
Appendix	36

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 dui dolore te feugait nulla facilisi. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur 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 dui 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 vor allem für das Resultat der Konvergenzgeschwindigkeit des einfach berechenbaren Neuronale Netze Regressionsschätzer benötigt 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 schätzenden Funktion komplett unbekannt, was von Vorteil hat dass weniger Annahmen getroffen werden müssen, man aber dadurch noch mehr Daten benötigt um eine Funktion zu schätzen.

Bei der nichtparametrischen Regressionsschätzung ist seien $(X, Y), (X_1, Y_1), (X_2, Y_2), \dots$ u.i.v $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ -wertige Zufallsvariablen mit $\mathbb{E}[Y^2] < \infty$. Zudem sei $m: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch $m(x) = \mathbb{E}[Y | X = x]$ die zugehörige Regressionsfunktion. Ausgehend von

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

soll m geschätzt werden.

Das Problem der Regressionsschätzung bei zufälligem Design lässt sich wie gefolgt erläutern. In Anwerndung ist üblicherweise die Verteilung von (X, Y) unbekannt, daher kann $m(x) = \mathbb{E}[Y | X = x]$ nicht berechnet werden. Oft ist es aber möglich, Werte von (X, Y) zu beobachten. Ziel ist es dann, daraus die Regressionsfunktion 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 $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 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 anstelle von m bei der Vorhersage bzw. Approximation des Wertes von Y .

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

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

Gesucht ist eine Schätzung

$$m_n(\cdot) = m_n(\cdot, \mathfrak{D}_n): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$$

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 1.1.1 ((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 $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ heißt (p, C) -glatte, falls für alle $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}_0^d$ mit $\sum_{j=1}^d \alpha_j = q$ die partielle Ableitung

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

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

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

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

Bemerkung 1.1.2. Im Falle von $p \leq 1$ ist keine Funktion (p, C) -glatte genau dann, wenn sie Hölder-stetig ist mit Exponent p und Hölder-Konstante C .

Der Ausgangspunkt für die Definition eines neuronalen Netzes ist die Wahl einer Aktivierungsfunktion $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Wir haben uns in dieser Arbeit für die sogenannten „squashing functions“ entschieden, welche eine monoton wachsend ist und für die $\lim_{x \rightarrow -\infty} \sigma(x) = 0$ und $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma(x) = 1$ gilt. Ein Beispiel für eine squashing function ist der sogenannte sigmoidal bzw. logistische squasher

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

Definition 1.1.3. Sei $n \in \mathbb{N}_0$. Eine Funktion $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ wird N -zulässig genannt, wenn monoton wachsend und Lipschitz stetig (REFERENZ) 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 $|\sigma(y) - 1| \leq \frac{1}{y}$. Wenn $y < 0$ ist, gilt $|\sigma(y)| \leq \frac{1}{|y|}$.

In Lemma 1.2.1 werden wir zudem zeigen, dass der logistische squasher (1.1) N -zulässig ist für beliebiges $N \in \mathbb{N}$.

1.2 Hilfsresultate

Lemma 1.2.1. Sei $N \in \mathbb{N}$ beliebig, dann erfüllt der logistische squasher $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$, $\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}$ die Bedingungen aus Definition 1.1.

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

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

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

$$\begin{aligned} & \exp(s) \leq \exp(t) \\ \Leftrightarrow & \exp(-s) \geq \exp(-t) \\ \Leftrightarrow & 1 + \exp(-s) \geq 1 + \exp(-t) \\ \Leftrightarrow & \frac{1}{1 + \exp(-s)} \leq \frac{1}{1 + \exp(-t)} \end{aligned}$$

folgt. Zudem ist σ als Komposition $N + 1$ mal stetig differenzierbarer Funktionen selber auch $N + 1$ mal stetig differenzierbar. Die Ableitungen von σ haben die Form:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma}{\partial x}(x) &= -\frac{1}{(1 + \exp(-x))^2} \cdot (-\exp(-x)) \\ &= \frac{\exp(-x)}{1 + \exp(-x)} \cdot \frac{1}{1 + \exp(-x)} \\ &= \left(1 - \frac{1}{1 + \exp(-x)}\right) \cdot \frac{1}{1 + \exp(-x)} \\ &= (1 - \sigma(x)) \cdot \sigma(x).\end{aligned}$$

Da wir bei weiterem Ableiten die Produktregel wiederholt anwenden sind alle Ableitungen von σ , Polynome in σ . Dadurch folgt Bedingung (i) aus Definition 1.1, 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 Lipschitz stetig 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 Polynome 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. Betrachten wir nun ein beliebiges $x > 0$. Dann wissen wir nach dem Mittelwertsatz (REFERENZ) dass ein $z \in (0, \infty)$ existiert, sodass mit $\exp(z) > 1$, da $z > 0$ ist, gilt:

$$(\exp(x) - 1) \cdot (x - 0) = e^z$$

und da $x \neq 0$ ist, daraus folgt, dass

$$\frac{\exp(x) - 1}{x - 0} > 1$$

gilt und damit dann auch durch Multiplikation mit x insbesondere

$$x \leq \exp(x) + 1.$$

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

$$\begin{aligned}
 x &\leq \exp(x) + 1 \\
 \Leftrightarrow x \cdot \exp(-x) &\leq 1 + \exp(-x) \\
 \Leftrightarrow \frac{\exp(-x)}{1 + \exp(-x)} &\leq \frac{1}{x} \\
 \Leftrightarrow 1 - \frac{1}{1 + \exp(-x)} &\leq \frac{1}{x} \\
 \Leftrightarrow |\sigma(x) - 1| &\leq \frac{1}{x}.
 \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{1 + \exp(x)} - \frac{1}{2} &= -\frac{1}{1 + \exp(-x)} + \frac{1}{2} \\
 \Leftrightarrow \frac{1}{1 + \exp(x)} + \frac{1}{2} - \frac{1}{1 + \exp(-x)} &= \frac{1}{2} \\
 \Leftrightarrow \frac{1 + \exp(-x) + 1 + \exp(x)}{(1 + \exp(x)) \cdot (1 + \exp(-x))} - \frac{1}{2} &= \frac{1}{2} \\
 \Leftrightarrow \frac{2 + \exp(-x) + \exp(x)}{2 + \exp(-x) + \exp(x)} - \frac{1}{2} &= \frac{1}{2} \\
 \Leftrightarrow 1 - \frac{1}{2} &= \frac{1}{2}.
 \end{aligned}$$

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:

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

Damit haben wir alle drei Bedingungen aus Definition 1.1 gezeigt und unsere Aussage bewiesen. □

Lemma 1.2.2. Sei $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ 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

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

für beliebige $x \in [-a, a]$:

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

- 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

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

für beliebige $x \in [-a, a]$:

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

Beweis. a) Sei $u = \frac{c}{R} + t_{\sigma,id}$, $\xi = 0$ und $x \in [-a, a]$ beliebig. Wir wissen, dass f_{id} 1-mal differenzierbar ist, da nach Voraussetzung σ 2-mal stetig differenzierbar ist, existiert nach der Restgliedformel von Lagrange (REFERENZ) ein $c \in [\xi, x]$, sodass mit Ausklammern von $\frac{R}{\sigma'(t_{\sigma,id})}$ folgt:

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

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) Folgt analog wie in a) durch 2-maliges Anwenden der Restgliedformel von Lagrange (REFeRENZ) auf die Funktion f die hier nun 2-mal differenzierbar ist, da σ nach Voraussetzung 3-mal stetig differenzierbar ist.

□

Lemma 1.2.3. Sei $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ nach Definition 1, 2-zulässig. Zudem sei $R > 0$ und $a > 0$ beliebig. Dann gilt für das neuronale Netz

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

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

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

Beweis. Durch Ausmultiplizieren erhalten wir

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

und

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

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

$$\begin{aligned} |f_{mult}(x, y) - x \cdot y| &= \frac{1}{4} \cdot |f_{sq}(x+y) - f_{sq}(x-y) - (x+y)^2 + (x-y)^2| \\ &\leq \frac{1}{4} \cdot |f_{sq}(x+y) - (x+y)^2| + \frac{1}{4} \cdot |(x-y)^2 - f_{sq}(x-y)| \\ &\leq 2 \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{40 \cdot \|\sigma'''\|_\infty \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, sq})|} \cdot \frac{1}{R} \\ &= \frac{20 \cdot \|\sigma'''\|_\infty \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_\sigma)|} \cdot \frac{1}{R}, \end{aligned}$$

wobei bei der letzten Ungleichung verwendet haben, dass $a > 0$ nach Lemma 1.2.2b) beliebig gewählt wurde und daher insbesondere für beliebiges $x \in [-2a, 2a]$

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

gilt.

□

Lemma 1.2.4. Sei $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ nach Definition 1, 2-zulässig. Sei f_{mult} das neuronale Netz aus Lemma 1.2.3 und f_{id} das neuronale Netz aus Lemma 1.2.2. Angenommen es gilt

$$a \geq 1 \quad \text{und} \quad R \geq \frac{\|\sigma''\|_{\infty} \cdot a}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, \text{id}})|}.$$

Dann erfüllt das neuronale Netz

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

für alle $x \in [-a, a]$:

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

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

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

und

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

Damit folgt aus der Homogenität des Betrags

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

Nach Lemma 1.2.2 und Lemma 1.2.3 gilt:

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

und

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

Da nach Voraussetzung $a \geq 1$ ist gilt insbesondere $[0, 1] \in [-2a, 2a]$ und daher gilt insbesondere $\sigma(x) \in [-2a, 2a]$. Zudem erhalten wir durch eine Nulladdition, das Anwenden der Dreiecksungleichung, die Verwendung von Lemma 1.2.2 und der Voraussetzung für R :

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

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

$$\begin{aligned} & |f_{ReLU}(x) - \max\{x, 0\}| \\ &= |f_{mult}(f_{id}(x), \sigma(R \cdot x)) - x \cdot \mathbb{1}_{[0, \infty)}(x)| \\ &\leq |f_{mult}(f_{id}(x), \sigma(R \cdot x)) - f_{id}(x) \cdot \sigma(R \cdot x)| \\ &\quad + |f_{id}(x) \cdot \sigma(R \cdot x) - x \cdot \sigma(R \cdot x)| + |x \cdot \sigma(R \cdot x) - x \cdot \mathbb{1}_{[0, \infty)}(x)|. \end{aligned}$$

Daraus ergibt sich mithilfe der obigen Eigenschaften und $a^3 \geq 1$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{160 \cdot \|\sigma'''\|_\infty \cdot a^3}{3 \cdot |\sigma''(t_\sigma)|} \cdot \frac{1}{R} + \frac{\|\sigma''\|_\infty \cdot a^3}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, id})|} \cdot \frac{1}{R} \cdot 1 + \frac{1}{R} \\ &\leq \left(\frac{160}{3} \cdot \frac{\|\sigma'''\|_\infty \cdot a^3}{|\sigma''(t_\sigma)|} + \frac{\|\sigma''\|_\infty \cdot a^3}{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, id})|} + \frac{a^3}{a^3} \right) \cdot \frac{1}{R} \\ &\leq \left(\frac{160 \cdot \|\sigma'''\|_\infty \cdot a^3 + 3 \cdot \|\sigma''\|_\infty \cdot a^3 + 3 \cdot a^3}{3 \cdot \min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, id})|, |\sigma''(t_\sigma)|, 1\}} \right) \cdot \frac{1}{R} \\ &\leq \frac{166}{3} \cdot \left(\frac{\max\{\|\sigma'''\|_\infty, \|\sigma''\|_\infty, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, id})|, |\sigma''(t_\sigma)|, 1\}} \right) \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R} \\ &\leq 56 \cdot \frac{\max\{|\sigma''|_\infty, \|\sigma'''\|_\infty, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma, id})|, |\sigma''(t_\sigma)|, 1\}} \cdot a^3 \cdot \frac{1}{R}. \end{aligned}$$

□

Lemma 1.2.5. Sei $M \in \mathbb{N}$ und sei $\sigma: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ 2-zulässig nach Definition Sei $a > 0$ und

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

sei $y \in [-a, a]$ und f_{ReLU} das neuronale Netz aus Lemma 1.2.4. Dann erfüllt das neuronale Netz

$$\begin{aligned} f_{hat, y}(x) &= f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x-y) + 1\right) - 2 \cdot f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x-y)\right) \\ &\quad + f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x-y) - 1\right) \end{aligned}$$

für alle $x \in [-a, a]$:

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

Beweis. Als erstes zeigen wir

$$\left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x|\right)_+ = \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot x + 1, 0\right\} - 2 \cdot \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot x, 0\right\} + \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot x - 1, 0\right\}, \quad (x \in \mathbb{R})$$

damit wir das Resultat mithilfe von Lemma 1.2.4 beweisen können. Um die obige Gleichung zu zeigen unterscheiden wir vier Fälle.

Fall 1 ($x < -\frac{M}{2a}$) In diesem Fall hat die linke Seite durch $z_+ = \max\{z, 0\}$ ($z \in \mathbb{R}$) und 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. Damit stimmt die rechte Seite mit der linken überein. (\square)

Fall 2 ($-\frac{M}{2a} \leq x \leq 0$) Dieser Fall liefert aufgrund der nicht Positivität von x analog das selbe Resultat wie Fall 1. (\square)

Fall 3 ($0 < x \leq \frac{M}{2a}$) 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 3.1 ($x \cdot \frac{M}{2a} \leq 1$) In diesem Fall gilt für die linke Seite:

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

und für die rechte Seite:

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

und stimmt daher mit der linken Seite überein.

Fall 3.2 ($x \cdot \frac{M}{2a} > 1$) In diesem Fall gilt für die linke Seite:

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

und für die rechte Seite:

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

und stimmt daher mit der linken Seite überein. Damit ist Fall 3 gezeigt. (\square)

Fall 4 ($\frac{M}{2a} < x$) 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 4.1 ($\frac{M}{2a} \cdot x \leq 1$) In diesem Fall gilt für die linke Seite:

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

und für die rechte Seite:

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

und stimmt daher mit der linken Seite überein.

Fall 4.2 ($\frac{M}{2a} \cdot x > 1$) In diesem Fall gilt für die linke Seite:

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

und für die rechte Seite:

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

und stimmt daher mit der linken Seite überein. Damit ist Fall 4 gezeigt. (\square)

Durch diese Fallunterscheidung wurde die obige Gleichung (REFERENZ) bewiesen.

Daraus folgt mit der Definition von $f_{hat,y}(x)$ und zwei mal der Dreiecksungleichung

$$\begin{aligned} \left| f_{hat,y}(x) - \left(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x - y|\right)_+ \right| &\leq \left| f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) + 1\right) - \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot (x - y) + 1, 0\right\} \right| \\ &\quad + 2 \cdot \left| f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y)\right) - \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot (x - y), 0\right\} \right| \\ &\quad + \left| f_{ReLU}\left(\frac{M}{2a} \cdot (x - y) - 1\right) - \max\left\{\frac{M}{2a} \cdot (x - y) - 1, 0\right\} \right| \\ &\leq 1792 \cdot \frac{\max\{\|\sigma''\|_\infty, \|\sigma'''\|_\infty, 1\}}{\min\{2 \cdot |\sigma'(t_{\sigma,id})|, |\sigma''(t_\sigma)|, 1\}} \cdot M^3 \cdot \frac{1}{R}, \end{aligned}$$

wobei die letzte Ungleichung daraus folgt, dass wir auf jeden Summanden mit $1 \leq a = M + 1$ Lemma 1.2.4 angewendet haben und die Abschätzung

$$(M + 1)^3 = M^3 + 3 \cdot M^2 + 3 \cdot M + 1 \leq M^3 + 3 \cdot M^3 + 3 \cdot M^3 + M^3 = 8 \cdot M^3 \quad (M \in \mathbb{N})$$

verwendet haben. \square

Das nächste Lemma stammt aus Schmidt-Hieber (2019) und wurde auf die Notation dieser Arbeit abgeändert.

Lemma 1.2.6. *Sei $M \in \mathbb{N}$, c_1 eine Konstante, $a > 0$, m eine (p, C) -glatte Funktion und $P(x)$ eine lokale Konvexkombination von Taylorpolynomen in m . Dann gilt:*

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

Kapitel 2

Konstruktion des Neuronale Netze Regressionsschätzers

In diesem Kapitel werden wir mithilfe von unseren gegebenen Datenmenge

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

unseren Regressionsschätzer konstruieren.

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

Ein mehrschichtiges feedforward neuronales Netz mit Architektur (L, k) und dem logistischen squasher (1.1) als Aktivierungsfunktion, ist eine reelwertige Funktion $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ 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 \mathfrak{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 $\mathbf{i} = (i^{(1)}, \dots, i^{(d)}) \in \{0, \dots, M\}^d$, sei

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

und sei

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

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

$$p_{\mathbf{i}_k}(x) = \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} \frac{1}{j_1! \dots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m}{\partial^{j_1} x^{(1)} \dots \partial^{j_d} x^{(d)}}(x_{\mathbf{i}_k}) \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \dots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d}$$

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

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

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 2.1.1. 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 nächsten 2^d Gitterpunkten, da $(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(j)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}|)_+ = 0$ immer dann gilt, wenn der Abstand zwischen $x^{(j)}$ und $x_{\mathbf{i}_k}^{(j)}$ größer als $\frac{2a}{M}$ ist.

i) Im folgenden wollen wir

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

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 $x_{\mathbf{i}_1}$ und $x_{\mathbf{i}_2}$ liegt. Damit folgt

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

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 nächsten 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 $(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(0,\dots,0)}^{(d+1)}|)$ bzw. $(1 - \frac{M}{2a} \cdot |x^{(d+1)} - x_{(1,\dots,1)}^{(d+1)}|)$ 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:

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

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

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

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

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

gelten.

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

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

Lemma 2.1.2. *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:*

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

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

$$\begin{aligned} m(x) &= T_{x_{\mathbf{i}_k}, q-1}[m(x)] \\ &= \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q-1\} \\ j_1 + \dots + j_d \leq q-1}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(x_{\mathbf{i}_k})}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d} \\ &\quad + \sum_{\substack{q-1 < j_1, \dots, j_d \leq q \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(\xi)}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d}. \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &\sum_{\substack{q-1 < j_1, \dots, j_d \leq q \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(\xi)}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot (x^{(1)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(1)})^{j_1} \cdots (x^{(d)} - x_{\mathbf{i}_k}^{(d)})^{j_d} \\ &\leq \sum_{\substack{q-1 < j_1, \dots, j_d \leq q \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m(\xi)}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}} \cdot \left(\frac{2a}{M} \right)^q \end{aligned}$$

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

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

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

$P(x)$ lässt sich in die Form

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

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

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

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

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

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 $R \geq 1$ 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 1.2.2 gezeigt, die Funktion $f(x) = x$ approximiert. Das neuronale Netz

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

welches, wie in Lemma 1.2.3 gezeigt, die Funktion $f(x, y) = x \cdot y$ approximiert. Das neuronale Netz

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

welches, wie in Lemma 1.2.4 gezeigt, die Funktion $f(x) = x_+$ approximiert und schließlich noch das neuronale Netz

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

welches, wie in Lemma 1.2.5 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 $f_{net,j_1,\dots,j_d,i_k}$ rekursiv definieren. Dafür wählen wir $N \geq q$, setzen $s = \lceil \log_2(N + d) \rceil$ und definieren für $j_1, \dots, j_d \in \{0, 1, \dots, N\}$ und $k \in \{1, \dots, (M + 1)^d\}$:

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

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

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

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

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

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-connected neuronalen Netzen die Gewichte der Verbindungen zwischen zwei Neuronen auf Null setzen kann, sind auch nicht fully-connected neuronale Netze in 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 $f_{net,j_1,\dots,j_d,\mathbf{i}_k}$.

2.2 Definition der Gewichte der Ausgabeschicht

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

$$\tilde{m}_n(x) = \sum_{k=1}^{(M+1)^d} \sum_{\substack{j_1,\dots,j_d \in \{0,\dots,q\} \\ j_1+\dots+j_d \leq q}} a_{\mathbf{i}_k,j_1,\dots,j_d} \cdot f_{net,j_1,\dots,j_d,\mathbf{i}_k}(x), \quad (2.7)$$

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

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

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

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

wobei

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

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

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

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

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

wobei $\mathbf{1}$ eine $J \times J$ -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

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - \tilde{m}_n(X_i)|^2 + \frac{c_3}{n} \cdot \sum_{\substack{j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\} \\ j_1 + \dots + j_d \leq q}} a_{\mathbf{i}_{k,j_1, \dots, j_d}}^2 \\
 &= \frac{1}{n} (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{a})^T (\mathbf{Y} - \mathbf{B}\mathbf{a}) + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{a}^T \mathbf{a} \\
 &= \frac{1}{n} (\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \mathbf{Y}^T \mathbf{B}\mathbf{a} - \mathbf{a}^T \mathbf{B}^T \mathbf{Y} + \mathbf{a}^T \mathbf{B}^T \mathbf{B}\mathbf{a}) + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{a}^T \mathbf{a} \\
 &= \frac{1}{n} (\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T \mathbf{B}\mathbf{a}) + \mathbf{a}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{B}^T \mathbf{B} + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{1} \right) \mathbf{a},
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

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

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

Zudem wissen wir dass $\frac{c_3}{n} \mathbf{1}$ 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 $\mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{a} = \mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{b} = \mathbf{Y}^T \mathbf{B}\mathbf{a}$, was aus der Symmetrie von \mathbf{A} folgt, erhalten wir:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{n} (\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}^T \mathbf{B}\mathbf{a}) + \mathbf{a}^T \left(\frac{1}{n} \mathbf{B}^T \mathbf{B} + \frac{c_3}{n} \cdot \mathbf{1} \right) \mathbf{a} \\
 &= \mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{a} + \mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{a} + \mathbf{a}^T \mathbf{A} \mathbf{b} + \mathbf{b}^T \mathbf{A} \mathbf{b} + \frac{1}{n} \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \frac{1}{n^2} \mathbf{Y}^T \mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y} \\
 &= \left(\mathbf{a} + \frac{1}{n} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y} \right)^T \mathbf{A} \left(\mathbf{a} + \frac{1}{n} \cdot \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y} \right) - \frac{1}{n} \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} - \frac{1}{n^2} \mathbf{Y}^T \mathbf{B} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{Y}.
 \end{aligned}$$

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:

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

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, ein Resultat zur Konvergenzgeschwindigkeit unseres neuronale Netze Regressionsschätzers 2.7.

Ziel im Folgenden ist die Abschätzung des erwarteten L_2 -Fehlers

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

im Falle des sogenannte ... Schätzers mit ...

Satz 3.0.1. *Angenommen die Verteilung von (X, Y) erfüllt*

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

für eine Konstante $c_4 > 0$ und die Verteilung von X hat einen beschränkten Träger $\text{supp}(\mathbb{P}_X)$ und sei $m(x) = \mathbb{E}[Y | X = x]$ 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 gilt für m_n 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 $c_7 > 0$ nicht von n abhängt.

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

Sei \mathfrak{F} die durch 2.1 definierte Menge von Funktionen mit $L = s + 2 = \lceil \log_2(N + d) \rceil + 2$, mit $k_1 = k_2 = \dots = k_L = 24 \cdot (N + d)$ und wo der Betrag der Gewichte durch $n^{c_2^0}$ beschränkt ist. Sei

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

wobei c_{21} wie unten gewählt wird und für die Kardinalität der Menge gilt

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

Ohne Berücksichtigung der Restriktion $j_1 + \dots + j_d \leq N$ lässt sich

$$|\{(j_1, \dots, j_d) \mid j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, N\}\}|$$

durch eine Analogie zu der Anzahl an Möglichkeiten, die man in einem Urnenexperiment berechnen in welchem man d -Mal mit Zurücklegen und mit Beachtung der Reihenfolge aus $(N + 1)$ Kugeln zieht. Durch das Weglassen der Restriktion erhalten wir

$$J_n \leq (M_n + 1)^d \cdot (N + 1)^d.$$

Sei

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

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

$$\max_{k \in \{1, \dots, (M_n+1)^d\}, j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\}, j_1 + \dots + j_d \leq q} \left| \frac{\partial^{j_1 + \dots + j_d} m}{\partial^{j_1} x^{(1)} \dots \partial^{j_d} x^{(d)}}(x_{\mathbf{i}_k}) \right| < \infty, \quad (3.1)$$

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

bisher gezeigten:

$$c_{21} = \max \left\{ \frac{1 + \mathbb{E}[Y^2]}{c_3}, (N+1)^d \cdot \max \left\{ \left| \frac{1}{j_1! \cdots j_d!} \cdot \frac{\partial^{j_1 + \cdots + j_d} m}{\partial^{j_1} x^{(1)} \cdots \partial^{j_d} x^{(d)}}(x_{\mathbf{i}_k}) \right|^2 : \right. \right. \\ \left. \left. j_1, \dots, j_d \in \{0, \dots, q\}, j_1 + \cdots + j_d \leq q \right\} \right\}. \quad (3.2)$$

Sei A_n das Event, dass

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

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

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

und durch

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(Y_1 \in \mathbb{R}, \dots, Y_n \in \mathbb{R}) &= \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}, \dots, (X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \\ &= \mathbb{P}((X_1, Y_1) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \cdots \mathbb{P}((X_n, Y_n) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}) \\ &= \mathbb{P}((X, Y) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R})^n \\ &= \mathbb{P}(Y \in \mathbb{R})^n \end{aligned}$$

dass die Zufallsvariablen Y_1, \dots, Y_n auch unabhängig und identisch verteilt sind. Daraus folgern wir mit Hilfe der Linearität des Erwartungswerts, dass $\mathbb{E}[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2] = \mathbb{E}[Y^2]$ gilt. Mit Hilfe der Monotonie und Homogenität der Wahrscheinlichkeitsfunktion \mathbb{P} und der Tschebyscheff Ungleichung für $\varepsilon = 1$ (REFERENZ) erhalten wir

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(A_n^c) &= \mathbb{P}\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \mathbb{E}[Y^2] \geq 1\right) \\ &\leq \mathbb{P}\left(\left|\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2 - \mathbb{E}[Y^2]\right| \geq 1\right) \\ &\leq \mathbb{V}\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i^2\right] \\ &= \frac{n \cdot \mathbb{V}[Y^2]}{n^2} \\ &= \frac{\mathbb{V}[Y^2]}{n} \\ &\leq \frac{c_{22}}{n}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

wobei wir bei der letzten Gleichheit die identische Verteiltheit der Y_1, \dots, Y_n und Rechenregeln für die Varianz verwendet haben welche wir unter anderem aufgrund der Unabhängigkeit der Y_1, \dots, 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, \dots, X_n und der Jensenschen Ungleichung (REFERENZ) erhalten wir:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n^c} \right] &= \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \right] \cdot \mathbb{P}(A_n^c) \\ &\leq \mathbb{E} \left[2m_n(x)^2 + 2m(x)^2 \mathbb{P}_X(dx) \right] \cdot \mathbb{P}(A_n^c) \\ &\leq \mathbb{E} \left[2\beta_n^2 + 2\beta_n^2 \mathbb{P}_X(dx) \right] \cdot \mathbb{P}(A_n^c) \\ &= 4\beta_n^2 \cdot \mathbb{P}(A_n^c), \end{aligned} \quad (3.4)$$

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 $\mathbb{P}(X \in \text{supp}(\mathbb{P}_X)) = 1$ ist. Durch unsere Definition von \hat{m}_n erhalten wir durch die Monotonie des Erwartungswert und der Abschätzung durch den ganzen Raum:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n} \right] &= \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n} \right] \\ &\leq \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \right]. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Zusammen mit (3.3), (3.4), (3.5) und der Linearität des Erwartungswerts erhalten wir dann:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} \int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) &= \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \cdot (\mathbb{1}_{A_n^c} + \mathbb{1}_{A_n}) \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n^c} \right] \\ &\quad + \mathbb{E} \left[\int |m_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \mathbb{1}_{A_n} \right] \\ &\leq 4\beta_n^2 \cdot \mathbb{P}(A_n^c) + \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \right] \\ &\leq \frac{4 \cdot c_{22} \cdot \beta_n^2}{n} + \mathbb{E} \left[\int |\hat{m}_n(x) - m(x)|^2 \mathbb{P}_X(dx) \right]. \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

erfüllen muss. □

Kapitel 4

Anwendungsbeispiel auf Simulierte Daten

Literaturverzeichnis

- [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.
- [Gla13] GLASSERMAN, P.: *Monte Carlo methods in financial engineering*, Band 53 der Reihe *Stochastic Modelling and Applied Probability*. Springer, New York, 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 I*. Springer, Berlin, 2007.
- [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 TBD.
- data_gen.py TBD.
- help_neural_networks.py fasst alle Hilfsfunktion zusammen.
- new_neural_network.py TBD.
- fc_neural_network.py TBD.
- nearest_neighbor.py TBD.
- constant.py TBD.

Listing 4.1: main.py

```
1  #!/usr/bin/env python3
2  # -*- coding: utf-8 -*-
3  """
4  Created on Wed Oct 23 15:08:26 2019
5
6  @author: adrian
7
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 from scipy.stats import iqr
16 from data_gen import gen_data_Y, error_limit
17 from constant import constant_estimate
18 from new_neural_network import new_neural_network_estimate
19 from nearest_neighbor import nearest_neighbor_estimate
20 from fc_neural_network import fc_neural_l_estimate
21
22 '''
23 EINDIMENSIONALER FALL (d = 1) wird geplottet
24 '''
25 N = 3
26 q = 2
27 R = 10 ** 6
28 a = 2
29 M = 2
30 d = 1
```

```

31
32 sigma = 0.05
33
34 n_train = 100
35 n_test = 2000
36 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
37 X_train = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_train),d))
38 m_X_train , Y_train = gen_data_Y(X_train , sigma)
39
40 X_test = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d))
41
42 Y_pred_new_nn = new_neural_network_estimate(X_train , Y_train , X_test , N, q, R, d, M, a,)
43 #Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train , Y_train , X_test)
44 #Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train , Y_train , X_test)
45 m_X_test , dummy = gen_data_Y(X_test , sigma)
46
47
48 #plt.plot(X_test , Y_pred_nearest_neighbor , '-r' , label='nearest_neighbor')
49 #plt.plot(X_test , Y_pred_fc_nn_1 , '-g' , label='fc_nn_1')
50 #colors = (0,0,0)
51 area = 4
52 plt.scatter(X_test , Y_pred_new_nn, s=area, color = 'red', alpha=0.5)
53 plt.title('Scatter plot pythonspot.com')
54 plt.xlabel('x')
55 plt.ylabel('y')
56 plt.show()
57 #plt.plot(X_test , Y_pred_new_nn , 'ro-' , label='new_nn')
58 #plt.plot(X_test , m_X_test , '-b' , label='m_d')
59 #plt.legend(loc='upper left')
60 #plt.xlim(-2, 2)
61 #plt.ylim(-2,2)
62 #plt.show()
63 #plt.savefig('foo.png')
64
65 '''
66 ZEIDIMENSIONALER FALL (d = 2) wird geplottet
67 '''
68 N = 2
69 q = 2
70 R = 10 ** 6
71 a = 2
72 M = 2
73 d = 2
74
75 sigma = 0.05
76
77 n_train = 100
78 n_test = 2000
79 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
80 X_train = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_train),d))
81 m_X_train , Y_train = gen_data_Y(X_train , sigma)
82
83 X_test = np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d))
84
85 Y_pred_new_nn = new_neural_network_estimate(X_train , Y_train , X_test , N, q, R, d, M, a,)
86 #Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train , Y_train , X_test)
87 #Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train , Y_train , X_test)
88 m_X_test , dummy = gen_data_Y(X_test , sigma)
89
90
91
92 x = np.ravel(X_test[:,0])
93 y = np.ravel(X_test[:,1])
94
95 # so wie es sein soll
96 #z = m_X_test[:,0]
97 # was der SChätzer auswirft
98 z = Y_pred_new_nn[:,0]
99
100 ax = plt.axes(projection='3d')
101 ax.scatter(x, y, z, c=z, cmap='viridis', linewidth=0.5);
102 ax.view_init(40, 20)
103 fig
104
105 '''

```

```

106 ein Vergleich des emp. L2 Fehler gemacht für d = 1
107 '''
108 n_train = 100
109 n_test = 2000
110 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
111
112 N = 3
113 q = 2
114 R = 10 ** 6
115 a = 2
116 M = 2
117 d = 1
118
119 sigma = 0.05
120
121 scaled_error = np.empty((5, 3,))
122 scaled_error[:] = np.nan
123
124 e_L2_avg = np.zeros(5)
125 e_L2_avg[:] = np.nan
126
127 for i in range(0,5,1):
128
129     X_train = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_train),d)), axis = 0)
130     m_X_train, Y_train = gen_data_Y(X_train, sigma)
131
132     X_test = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d)), axis = 0)
133
134     #Y_pred_constant = constant_estimate(Y_train)
135     Y_pred_new_nn = new_neural_network_estimate(X_train, Y_train, X_test, N, q, R, d, M, a,)
136     Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train, Y_train, X_test)
137     Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train, Y_train, X_test)
138
139     m_X_test, not_needed = gen_data_Y(X_test, sigma)
140
141     e_L2_new_nn = np.mean(sum(abs(Y_pred_new_nn - m_X_test) ** 2))
142     e_L2_fc_nn_1 = np.mean(sum(abs(Y_pred_fc_nn_1 - m_X_test) ** 2))
143     e_L2_nearest_neighbor = np.mean(sum(abs(Y_pred_nearest_neighbor - m_X_test) ** 2))
144
145     for j in range(0,5,1):
146
147         X = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(n_test,d)), axis = 0)
148         m_X, Y = gen_data_Y(X, sigma)
149         Y_pred_constant = constant_estimate(Y)
150
151         e_L2_avg[j] = np.mean(sum(abs(Y_pred_constant - m_X) ** 2))
152
153     scaled_error[i,0] = e_L2_new_nn / np.median(e_L2_avg)
154     scaled_error[i,1] = e_L2_fc_nn_1 / np.median(e_L2_avg)
155     scaled_error[i,2] = e_L2_nearest_neighbor / np.median(e_L2_avg)
156
157 iqr_new_nn = iqr(scaled_error[:,0])
158 iqr_fc_nn_1 = iqr(scaled_error[:,1])
159 iqr_nearest_neighbor = iqr(scaled_error[:,2])
160
161 median_new_nn = np.median(scaled_error[:,0])
162 median_fc_nn_1 = np.median(scaled_error[:,1])
163 median_nearest_neighbor = np.median(scaled_error[:,2])
164
165 rows = ["noise", "e_L2_avg", "approach", "new_nn", "fc_nn_1", "nearest_neighbor"]
166
167 series_noise_1 = pd.Series([repr(sigma)+'%', np.median(e_L2_avg), "(Median, IQR)", (median_new_nn, iqr_new_nn), (median_fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
168 series_noise_1.name = ""
169 #series_noise_2 = pd.Series([repr(sigma)+'%', np.median(e_L2_avg), "(Median, IQR)", (median_new_nn, iqr_new_nn), (median_fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
170 #series_noise_2.name = ""
171
172 error_df = pd.concat([series_noise_1], axis=1)
173 print(error_df)
174 #error_df.to_csv('out.csv', index = True)
175
176 '''
177 ein Vergleich des emp. L2 Fehler gemacht für d = 2
178 '''

```

```

179 n_train = 100
180 n_test = 2000
181 # Parameter für unseren neuen Neuronale-Netze-Regressionschätzer
182
183 N = 2
184 q = 2
185 R = 10 ** 6
186 a = 2
187 M = 2
188 d = 2
189
190 sigma = 0.05
191
192 scaled_error = np.empty((5, 3,))
193 scaled_error[:] = np.nan
194
195 e_L2_avg = np.zeros(5)
196 e_L2_avg[:] = np.nan
197
198 for i in range(0,5,1):
199
200     X_train = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_train),d)), axis = 0)
201     m_X_train, Y_train = gen_data_Y(X_train, sigma)
202
203     X_test = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(int(n_test),d)), axis = 0)
204
205     #Y_pred_constant = constant_estimate(Y_train)
206     Y_pred_new_nn = new_neural_network_estimate(X_train, Y_train, X_test, N, q, R, d, M, a,)
207     Y_pred_fc_nn_1 = fc_neural_1_estimate(X_train, Y_train, X_test)
208     Y_pred_nearest_neighbor = nearest_neighbor_estimate(X_train, Y_train, X_test)
209
210     m_X_test, not_needed = gen_data_Y(X_test, sigma)
211
212     e_L2_new_nn = np.mean(sum(abs(Y_pred_new_nn - m_X_test) ** 2))
213     e_L2_fc_nn_1 = np.mean(sum(abs(Y_pred_fc_nn_1 - m_X_test) ** 2))
214     e_L2_nearest_neighbor = np.mean(sum(abs(Y_pred_nearest_neighbor - m_X_test) ** 2))
215
216     for j in range(0,5,1):
217
218         X = np.sort(np.random.uniform(low=-2,high=2,size=(n_test,d)), axis = 0)
219         m_X, Y = gen_data_Y(X, sigma)
220         Y_pred_constant = constant_estimate(Y)
221
222         e_L2_avg[j] = np.mean(sum(abs(Y_pred_constant - m_X) ** 2))
223
224         scaled_error[i,0] = e_L2_new_nn / np.median(e_L2_avg)
225         scaled_error[i,1] = e_L2_fc_nn_1 / np.median(e_L2_avg)
226         scaled_error[i,2] = e_L2_nearest_neighbor / np.median(e_L2_avg)
227
228         iqr_new_nn = iqr(scaled_error[:,0])
229         iqr_fc_nn_1 = iqr(scaled_error[:,1])
230         iqr_nearest_neighbor = iqr(scaled_error[:,2])
231
232         median_new_nn = np.median(scaled_error[:,0])
233         median_fc_nn_1 = np.median(scaled_error[:,1])
234         median_nearest_neighbor = np.median(scaled_error[:,2])
235
236         rows = ["noise", "e_L2_avg", "approach", "new_nn", "fc_nn_1", "nearest_neighbor"]
237
238         series_noise_1 = pd.Series([repr(sigma)+'%', np.median(e_L2_avg), "(Median, IQR)", (median_new_nn, iqr_new_nn), (median_fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
239         series_noise_1.name = ""
240         #series_noise_2 = pd.Series([repr(sigma)+'%', np.median(e_L2_avg), "(Median, IQR)", (median_new_nn, iqr_new_nn), (median_fc_nn_1, iqr_fc_nn_1), (median_nearest_neighbor, iqr_nearest_neighbor)], index=rows)
241         #series_noise_2.name = ""
242
243         error_df = pd.concat([series_noise_1], axis=1)
244         print(error_df)
245     #error_df.to_csv('out.csv', index = True)

```

Listing 4.2: data_gen.py

```

1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-

```

```

3 """
4 Created on Fri Oct 11 12:01:42 2019
5
6 @author: adrian
7
8 Generieren der Daten die wir für einen Vergleich von Regressionschätzern benötigen
9 """
10 # Wir wählen x gleichverteilt auf  $[-1,1]^d$ , wobei d die dimension des Inputs ist
11 # n is die Größe der Stichprobe
12
13 import numpy as np
14 from scipy.stats import iqr
15
16 # Regressionsfunktionen
17 #
18 # x: Ein Vektor  $x \in [-1,-1]^d$ 
19 # d: Dimension des Vektors x
20
21 def m_d (x, d):
22
23     pi = np.pi
24     cos = np.cos
25     sin = np.sin
26     exp = np.exp
27
28     if d == 1:
29         return sin(0.2 * x[0] ** 2) + exp(0.5 * x[0]) + x[0] ** 3
30
31     elif d == 2:
32         return np.sin(np.sqrt(x[0] ** 2 + x[1] ** 2))
33
34     else:
35         print("Your data has the wrong dimension!")
36
37 def error_limit (x, p, c, d):
38
39     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: Inputdaten der Form  $(X_1, \dots, X_n)$ , wobei  $X_i \in [-1,-1]^d$  für  $i = 1, \dots, n$ 
44 # sigma: Schwankung in den Werten (Noise)  $\in \{0.05, 0.1\}$ 
45
46 def gen_data_Y (X, sigma):
47
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):
56         m_X[t] = m_d(X[t], d)
57
58     Y = m_X + sigma * iqr(m_X) * S
59     return (m_X, Y)

```

Listing 4.3: help_neural_networks.py

```

1 #!/usr/bin/env python3
2 # -*- coding: utf-8 -*-
3 """
4 Created on Tue Oct 15 11:22:02 2019
5
6 @author: adrian
7
8 Implementation von Neuronale-Netzen welche wir für die Konstruktion unseres
9 Neuronale-Netze-Regressionschätzers benötigen
10 """
11 import numpy as np
12
13 # Sigmoidfunktion
14 #

```



```

15 # x: x \in \mathbb{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 #
23 # x: reelle Zahl
24 # R: reelle Zahl >= 1
25
26 def f_id (x, R):
27
28     return 4 * R * sigmoid(x / R) - 2 * R
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
35
36 def f_mult (x, y, R):
37
38     return (((R ** 2) / 4) * (((1 + np.exp(-1)) ** 3) / (np.exp(-2) - np.exp(-1)))) \
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
52 #
53 # x: reelle Zahl
54 # y: fixe reelle Zahl
55 # R: reelle Zahl >= 1
56 # M: fixe natürliche Zahl
57 # a: fixe Zahl > 0
58
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 -*-
3 """
4 Created on Wed Oct 16 15:40:14 2019
5
6 @author: adrian
7
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
17
18 # Neuronales Netz welches die Funktion f(x) = (x^(1)- x_ik^(1))^j1 * ... *
19 # (x^(d) - x_ik^(d))^jd * \prod_{j = 1}^d max((1 - (M/2a) * abs(x^(j) - x_ik^(j))), 0)
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,...,j_d \in {0,1,...,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
31
32 def f_net(x, d, j_l_d, X_i, N, q, s, R, M, a):
33     # initialize f_l_k
34     # (2 ** s) + 1
35     # ((1 + M) ** d) + 1
36     f_l_k = np.empty((s + 1, (2 ** s) + 1,))
37     f_l_k[:] = np.nan
38
39
40     for k in range(np.sum(j_l_d) + d + 1, (2 ** s) + 1, 1):
41         f_l_k[s, k] = 1
42
43     for k in range(1, d + 1, 1):
44         f_l_k[s, np.sum(j_l_d) + k] = f_hat(x[k - 1], X_i[k - 1], R, M, a)
45
46     for l in range(1, d + 1, 1):
47         k = j_l_d[range(0, l - 1, 1)].sum() + 1
48         while k in range(j_l_d[range(0, l - 1, 1)].sum() + 1, j_l_d[range(0, l, 1)].sum() + 1, 1):
49             f_l_k[s, k] = f_id(f_id(x[l - 1] - X_i[l - 1], R), R)
50             k += 1
51
52     for l in range(s - 1, -1, -1):
53         for k in range((2 ** l), 0, -1):
54             f_l_k[l, k] = f_mult(f_l_k[l + 1, (2 * k) - 1], f_l_k[l + 1, 2 * k], R)
55
56     return f_l_k[0, 1]
57
58 # Bestimmung der Gewichte der Ausgabeschicht durch lösen eines regularisierten
59 # Kleinste-Quadrate Problems
60 #
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
72     s = math.ceil(math.log2(N + d))
73
74     # Anzahl der Eingabevektoren X_1, ..., 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
83     # Anzahl der Spalten der Matrix für das Kleinste-Quadrate Problem
84     # In den Spalten sind die Funktionswerte von f_net eingespeichert
85
86     J = int(((1 + M) ** d) * scipy.special.binom(N + d, d))
87
88     # Für die Konstruktion der Matrix brauchen wir erstmal alle Inputparameter
89     # für f_net, da wir dort nur den Funktionswert für einen Vektor j_1, ..., j_d einsetzen
90     # müssen wir erstmals alle möglichen Vektoren dieser Art konstruieren die die Bedingung 0 <= j_1 + ... + j_d <= N
91     # erfüllen
92     # X_ik hat in den Zeilen die Vektoren X_i aus dem Paper
93
94     X_ik = np.transpose(np.empty((d, (1 + M) ** d,)))
95     X_ik[:] = np.nan
96
97     I_k = np.array(list(itertools.product(range(0, M + 1), repeat = d)))
98     X_ik[:] = (I_k[:] * ((2 * a) / M)) - a

```

```

98
99     all_jl_jd = np.array(list(itertools.product(range(0, N + 1), repeat = d)))
100     all_jl_jd_by_cond = all_jl_jd[all_jl_jd.sum(axis=1) <= 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)):
108             for z in range(0, int(scipy.special.binom(N + d, d))):
109                 B[i, j] = f_net(X[i], d, all_jl_jd_by_cond[z], X_ik[k], N, q, s, R, M, a)
110                 j += 1
111
112     #weights = np.linalg.solve((1 / n) * np.dot(np.transpose(B),B) + (c_3 / n) * np.identity(J), (1 / n) * np.dot(np.
113         transpose(B),Y))
114     weights = np.linalg.solve(np.dot(np.transpose(B),B) + (c_3) * np.identity(J), np.dot(np.transpose(B),Y))
115     return (weights, J, all_jl_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 # X: Eingabevektoren der Form (X_1,...,X_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1), ..., (X_n,Y_n)
121 # Y: Eingabevektoren der Form (Y_1,...,Y_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1), ..., (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
132     Y_pred = np.empty((len(X_test), 1,))
133     Y_pred[:] = np.nan
134
135     s = math.ceil(math.log2(N + d))
136
137     weights, J, all_jl_jd_by_cond, X_ik = output_weights(X_train, Y_train, N, q, R, d, M, a)
138
139     F_net = np.empty((1, J,))
140     F_net[:] = np.nan
141
142     for u in range(0, len(X_test), 1):
143         j = 0
144         while j < J:
145             for k in range(0, ((M + 1) ** d)):
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_jl_jd_by_cond[z], X_ik[k], N, q, s, R, M, a)
148                     j += 1
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 -*-
3  """
4  Created on Fri Oct 11 14:23:15 2019
5
6  @author: adrian
7  """
8  import numpy as np
9  from keras.models import Sequential
10 from keras.layers import Dense
11
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,...,X_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1), ..., (X_n,Y_n)

```

```

16 # Y: Eingabevektoren der Form (Y_1,...,Y_n) für das Neuronale Netz aus dem Datensatz (X_1,Y_1) ,...,(X_n,Y_n)
17
18 def fc_neural_l_estimate (X_train,Y_train,X_test):
19
20     Ynew = np.empty((len(X_train), len([5,10,25,50,75]),))
21     Ynew[:] = np.nan
22
23     count = 0
24     n_neurons = [5,10,25,50,75]
25
26     d = np.size(X_train, 1)
27
28     for j in n_neurons:
29         model = Sequential()
30         model.add(Dense(j, input_dim=d, activation='relu'))
31         model.add(Dense(1, activation='linear'))
32         model.compile(loss='mse', optimizer='adam')
33         model.fit(X_train, Y_train, epochs=1000, verbose=0)
34
35         Ynew[:,count] = model.predict(X_train)[: ,0]
36         count += 1
37
38     Diff = Ynew[:] - Y_train[:]
39     best_n_neurons = n_neurons[(1/len(X_train) *(Diff.sum(axis=0) ** 2)).argmax()]
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)
46
47     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 """
9
10 # Generate sample data
11 import numpy as np
12 from sklearn import neighbors
13 from sklearn.model_selection import GridSearchCV
14 import warnings
15
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
19 #   Nachbarn die betrachtet werden
20 #   sollen welches die beste Wahl ist.
21 #
22 # X: Inputvektor für das Kalibrieren des Modells
23 # Y: Inputvektor für das Kalibrieren des Modells (Zielvektor an den die Gewichte angepasst werden)
24 # T: Inputvektor für den eine Vorhersage bestimmte werden soll
25
26 def nearest_neighbor_estimate (X_train,Y_train,X_test):
27
28     params = {'n_neighbors':[2,3,4,5,6,7,8,9], 'weights': ['uniform', 'distance']}
29
30     knn = neighbors.KNeighborsRegressor()
31
32     knn_gridsearch_model = GridSearchCV(knn, params, cv=5)
33     knn_gridsearch_model.fit(X_train,Y_train)
34
35     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  $Y_i \in \mathbb{R}$  für  $i = 1, \dots$ 
15
16 def constant_estimate(Y):
17     m = np.zeros((len(Y),1,))
18     m[:] = mean(Y)
19     return m

```