Introduction to Data Science
Prof. Dr. Bernhard Drabant

WWI21DS

Example Sheet 4 – Master Solution

16 December 2021

1 Lineare Regression

Für die zu untersuchenden Daten soll eine lineare Beziehung der Eingangsvariable X der Datenobjekte und deren Zielvariable Y angenommen werden, die durch ein lineares Modell φ gemäß $\varphi(X) = w_1 X + w_0$ mit noch nicht bekannten Parametern w_0 und w_1 approximiert wird.

Um die unbekannten Parameter w_0 und w_1 des Modells φ zu ermitteln, verwenden wir die mittlere quadratische Abweichung auf den Trainingsdaten.

Der Trainingsdatensatz $TR = \{(X_k, Y_k)\}_{k=1,...,n}$ besteht aus n Trainingsobjekten mit Eingangswerten X_k und Zielwerten Y_k für $k = 1, ..., n$.

1. Bilden Sie die mittlere quadratische Abweichung für das Modell φ auf den Trainingsdaten TR.
2. Formulieren Sie das Extremwertproblem für das Modell φ als Funktion der beiden Parameter w_0 ud w_1 und ermitteln Sie daraus die beiden linearen Gleichungen, die die Parameter w_0 und w_1 notwendigerweise erfüllen müssen.
3. Lösen Sie das Extremwertproblem aus Teilaufgabe (2) und geben Sie die stationären Punkte explizit an.

Solution:

1. Mittlere quadratische Abweichung:

$$\mathbf{MQA}_{\varphi}(TR) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(\varphi(X_k) - Y_k)^2 = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(w_1 X_k + w_0 - Y_k)^2$$

2. Extremwertproblem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{MQA}}{\partial w_0} &= -\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}(Y_k - w_0 - w_1 X_k) = 0 \\ \frac{\partial \mathbf{MQA}}{\partial w_1} &= -\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}(Y_k - w_0 - w_1 X_k)X_k = 0 \end{aligned} \tag{1}$$

3. Aus den Gleichungen (1) erhält man für die Werte (w_0, w_1) des stationären Punktes

$$\begin{aligned} w_0 &= \left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k\right) - w_1 \cdot \left(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} X_k\right) \\ w_1 &= \frac{n\left(\sum_{k=1}^{n} X_k Y_k\right) - \left(\sum_{k=1}^{n} X_k\right)\left(\sum_{k=1}^{n} Y_k\right)}{n\left(\sum_{k=1}^{n} X_k^2\right) - \left(\sum_{k=1}^{n} X_k\right)^2} \end{aligned} \tag{2}$$

   Warum? Leiten Sie die Gleichungen (2) aus den Gleichungen (1) her.

   Somit ist das Tupel (w_0, w_1) des stationären Punktes geschlossen durch die Werte (X_k, Y_k), $k = 1, ..., n$ der n Datenpunkte darstellbar.

2 Funktionen mehrerer Variablen und stationäre Punkte

Die Funktion $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{B}$ zweier Variablen x und y sei gegeben durch

$$f(x, y) = \mathbf{v}^2 \cdot (\mathbf{v}^2 - 1) + \frac{1}{2}$$

mit $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$ und $\mathbf{v}^2 = x^2 + y^2$.

1. Berechnen Sie alle stationären Punkte der Funktion f.
2. Argumentieren Sie anschaulich, welche der Punkte lokale Maxima bzw. lokale Minima sind.
3. (*) Verwenden Sie die Hesse-Matrix, um analytisch zu prüfen, welche der Punkte lokale Maxima bzw. lokale Minima sind.

Solution:

1. Zuerst werden die partiellen Ableitungen $\frac{\partial f}{\partial x}$ und $\frac{\partial f}{\partial y}$ berechnet.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}^2) \cdot (\mathbf{v}^2 - 1) + \mathbf{v}^2 \cdot \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{v}^2 - 1) \\ &= 2\,x \cdot (\mathbf{v}^2 - 1) + \mathbf{v}^2 \cdot 2\,x = 2\,x \cdot (2\,\mathbf{v}^2 - 1)\,.\end{aligned}$$

   Aus Symmetriegründen erhält man entsprechend $\frac{\partial f}{\partial y} = 2\,y \cdot (2\,\mathbf{v}^2 - 1)$.

   Die stationären Punkte werden somit durch die Bedingung

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x} &= 2\,x \cdot (2\,\mathbf{v}^2 - 1) = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} &= 2\,y \cdot (2\,\mathbf{v}^2 - 1) = 0\end{aligned} \tag{3}$$

   ermittelt. Zur Lösung von (3) führen wir eine Fallunterscheidung durch.

   (a) $x = 0$: Die einzige nicht triviale Gleichung ist $2\,y \cdot (2\,\mathbf{v}^2 - 1) = 0$. Diese Gleichung ist erfüllt für
      i. $y = 0$
      ii. $y \neq 0$ und $(2\,\mathbf{v}^2 - 1) - 1) = (2\,\mathbf{y}^2 - 1) = 0$, woraus $y = \pm\frac{\sqrt{2}}{2}$ folgt.

   (b) $x \neq 0$: Dann muss $2\,\mathbf{v}^2 - 1 = 0$ erfüllt sein, woraus folgt $\mathbf{v}^2 = x^2 + y^2 = \frac{1}{2}$. Das sind alle Punkte (x, y) mit $x \neq 0$ in $\mathbb{R}^2$ auf dem Kreis mit Radius $r = \frac{\sqrt{2}}{2}$ um den Nullpunkt $(0, 0)$.

   Die Menge der stationären Punkte ist daher gegeben durch

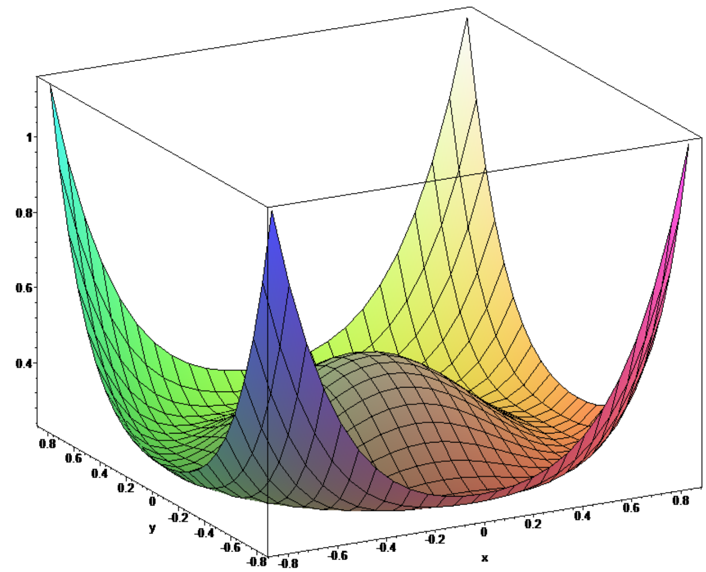
$$S_f = \{(x, y) \mid (x, y) = 0 \text{ oder } x^2 + y^2 = \frac{1}{2}\}$$

   Wie man umgehend sieht, nimmt f in den stationären Punkten $(x, y) \in S_f$ die Funktionswerte

$$f(x, y) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{für } (x, y) = (0, 0) \\ \frac{1}{4} & \text{für } (x, y) \neq (0, 0) \end{cases}$$

   an.

2. Daraus lässt sich durch Untersuchung des Funktionsgraphen (siehe Abbildung) schließen, dass $(x, y) = (0, 0)$ ein lokales Maximum ist und die Punkte (x, y) mit $x^2 + y^2 = \frac{1}{2}$ eine minimale Kreislinie bilden.



3. (*) Eine genaue quantitative Analyse mithilfe der Hesse-Matrix

$$H_f(x,y) = \begin{pmatrix} \partial_{x,x} f & \partial_{x,y} f \\ \partial_{y,x} f & \partial_{y,y} f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8\,x^2 + 4\,\mathbf{v}^2 - 2 & 8\,x\,y \\ 8\,x\,y & 8\,y^2 + 4\,\mathbf{v}^2 - 2 \end{pmatrix}$$

liefert

$$H_f(0,0) = \begin{pmatrix} -2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix}$$

und

$$H_f(x,y) = \begin{pmatrix} 8\,x^2 & 8\,x\,y \\ 8\,x\,y & 8\,y^2 \end{pmatrix}$$

für alle Punkte (x,y) mit $x^2 + y^2 = \frac{1}{2}$.

Somit gilt $H_f(0,0)_{x,x} = -2 < 0$ und $\det(H_f(0,0)) = 4 > 0$, woraus folgt, dass $(0,0)$ ein lokales Maximum ist. Für die Punkte (x,y) mit $x^2 + y^2 = \frac{1}{2}$ gilt $\det(H_f(x,y)) = 0$, woraus sich mithilfe der Hesse-Matrix keine Aussage über die Extremaleigenschaften dieser Punkte treffen lässt.

Beachte: Die Notationen $\partial_{x,x} f$ und $\partial_{x,y} f$ sind eine Kurschreibweise der zweifachen Ableitungen $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ bzw. $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}$. Entsprechendes gilt für $\partial_{y,y} f$ und $\partial_{y,x} f$.