

Notizen zur SMD

Numerische Grundlagen

Zahlendarstellungen

Jede Zahl kann dargestellt werden mit Vorzeichen, Mantisse, Basis und Exponent.

$$x = s \cdot m \cdot b^e$$

Fließkommazahlen werden üblicherweise im IEEE754 Standard gespeichert. Das Format erlaubt nur $b \in \{2, 10\}$. In alle landläufigen Systemen ist die Basis gleich 2. Der Standard erzwingt die **eindeutige** Darstellung der Zahlen in dem die Darstellung mit dem kleinsten Exponenten gewählt wird.

Nach IEEE754 ist der Exponent immer positiv. Zum Exponent mit N Bits wird bei jeder Rechnung einfach der Bias von $2^{N-1} - 1$ hinzuaddiert. Auf einen 8 Bit Exponenten also einfach der Bias von 127 hinzuaddiert.

Vorsicht ist geboten da der Signifikant bzw. die Mantisse ein *implizites Bit* versteckt. Da durch die Wahl des minimalen Exponenten das führende Bit der Mantisse immer 1 sein muss.

Runden

Nach Vorlesung gilt

Eine Rundung heißt korrekt, wenn zwischen einer reellen Zahl x und ihrer gerundeten Zahl \tilde{x} keine Maschinenzahl liegt.

Rundungsfehler können sich im Laufe einer Rechnung fortpflanzen. So spielt in manchen Fällen die Reihenfolge der Ausführung von Operationen eine Rolle für die Genauigkeit des Ergebnisses. Auch wenn sie mathematisch kommutieren.

Kondition und Stabilität

Sei $f(x)$ eine bekannte analytische Funktion, $\tilde{f}(x)$ die numerische Näherung und \tilde{x} die gestörte Eingabe. So gilt nach Dreiecksungleichung

$$\|f(x) - \tilde{f}(\tilde{x})\| = \|f(x) - f(\tilde{x}) + f(\tilde{x}) - \tilde{f}(\tilde{x})\| \leq \|f(x) - f(\tilde{x})\| + \|f(\tilde{x}) - \tilde{f}(\tilde{x})\|$$

Dabei nennt man $\|f(x) - f(\tilde{x})\|$ die Kondition und $\|f(\tilde{x}) - \tilde{f}(\tilde{x})\|$ die Stabilität.

Das Verfahren heißt stabil für Maschinengenauigkeit ϵ und relative Kondition κ wenn

$$\exists \sigma \in \mathbb{R} : \|f(\tilde{x}) - \tilde{f}(\tilde{x})\| \leq \kappa \sigma \epsilon.$$

Sei $f(x)$ differenzierbar in x so lässt sich die relative Konditionszahl bestimmen über

$$\kappa = \frac{\|f'(x)\| \cdot \|x\|}{\|f(x)\|}$$

Für die Problem in der SMD reicht aber auch die einfach euklidische Metrik aus

$$\kappa = \left| \frac{f'(x) \cdot x}{f(x)} \right|$$

Ob ein gegebener Ausdruck numerisch Stabil aufgrund von Maschinenunengenauigkeit ist lässt sich nicht so einfach sagen. K.P. was die im Skript machen.

Stochastik

Für die Kolgomorov Axiome benötigt man folgende Definitionen

- Zunächst braucht man die Ergebnismenge Ω , also die Menge der möglichen Ergebnissen eines Zufallsexperimentes. z.B $\Omega = \{Kopf, Zahl\}$
- Dann den Ereignisraum Σ welcher unter Mengenoperationen \cup, \cap, \setminus abgeschlossen ist und Ω enthält. Häufig ist Σ also einfach die Potenzmenge von Ω
- Ein σ -Maß P auf Ω welches in das Intervall $[0, 1]$ abbildet.

Die Kolgomorov Axiome definieren den Begriff der Wahrscheinlichkeit:

1. Ein Ereignis $A \in \Sigma$ hat eine Wahrscheinlichkeit zugeordnet $0 \leq P(A) \leq 1$
2. Für das sichere Ereignis Ω gilt $P(\Omega) = 1$
3. Für paarweise disjunkte $A_i \subset \Sigma$ gilt $P(A_1 \dot{\cup} A_2 \dot{\cup} \dots) = \sum_i P(A_i)$

Eine wichtige Folgerung daraus ist die Wahrscheinlichkeit der Vereinigung mehrerer Ereignisse die nicht Disjunkt sind. $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$. Es gilt also das [Prinzip von Inklusion und Exklusion](#)

Bedingte Wahrscheinlichkeiten

Die definition der Bedingten Wahrscheinlichkeit lautet:

$$P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$$

Dies genügt den Kolgomorov Axiomen wenn $B = \Omega$ die neue Ergebnismenge ist. (Da offensichtlich $P(B|B) = 1$ etc ...)

Sind zwei Ereignisse unabhängig so gilt per definition der bedingten Wahrscheinlichkeiten $P(A|B) = P(A)$ Mit der Definition von oben gilt also sofort

$$P(A|B) \cdot P(B) = P(A) \cdot P(B) = P(A \cap B)$$

Larifaari ausgedrückt sind lassen sich unabhängige Ereignisse also miteinander Multiplizieren.

Verteilungsfunktionen und Wahrscheinlichkeitsdichten

In den aller meisten Fällen lassen sich den Elementarereignissen $\omega \in \Omega$ Zahlen zuordnen. Das erlaubt die Definition der Verteilungsfunktion und Wahrscheinlichkeitsdichten. Diese Zuordnung wird Zufallsvariable genannt. Das wird im Skript komplett unterschlagen. Sei X also eine Zufallsvariable so lässt sich die Verteilungsfunktion definieren als:

$$P(X \leq x) = F(x)$$

Dabei ist X die Menge der $\omega \in \Omega$ für die $X(\omega) \leq x$. Entsprechend folgt

$$P(X \geq x) = 1 - F(x)$$

und

$$P(a < X \leq b) = F(b) - F(a)$$

Wenn $F(x)$ stetig ist (siehe [Satz von Radon-Nikod](#)) , lässt sich die Wahrscheinlichkeitsdichte definieren durch

$$f(x) = \frac{dF(x)}{dx}$$

Andersherum ausgedrückt

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(x)dx$$

Jetzt lassen sich Erwartungswerte für kontinuierliche und diskrete Zufallsvariablen definieren.

$$E[g(X)] = \sum g(x) \cdot P(X = x)$$

$$E[g(X)] = \int g(x) \cdot f(x)$$

Für alle vernünftigen Funktionen g . Der Erwartungswert ist eine Lineare Abbildung und wird häufig mit dem Buchstaben μ abgekürzt.

Statistische Momente

Eng verwandt mit dem Erwartungswert sind die Momente. Das k -te Zentrale Moment für eine Zufallsvariable X mit Erwartungswert $E(X) = \mu$ ist definiert als

$$\mu_k(X) = E((X - \mu)^k)$$

Für $k = 2$ wird das Moment auch Varianz $Var(X) = \sigma^2$ genannt. Für die Varianz gilt der Verschiebungssatz (auch Satz von Steiner). Wir nutzen die Linearität des Erwartungswertes um die eigenschaft zu zeigen.

$$Var(X) = E((X - \mu)^2) = E(X^2 - 2\mu X + \mu^2) = E(X^2) - 2E(X)E(X) + E(X)^2 = E(X^2) - \mu^2$$

Die Varianz ist ein Streuungsmaß für eine Zufallsvariable. Für die Varianz gilt immer

$$Var(aX + b) = a^2 Var(X)$$

mit den reellen Parametern a, b .

Für $k = 3$ wird die Größe Schiefe (Skewness) und für $k = 4$ Wölbung (Kurtosis) genannt. Häufig werden die Größen in Einheiten der Standardabweichung angegeben. Also jeweils noch durch σ^k geteilt. In der Vorlesung auch.

Quantile

Quantile einer Zufallsvariable lassen sich sehr einfach mit der Verteilungsfunktion definieren. Das Quantil x_q ist der Wert für den gilt

$$F(x_q) = P(X < x_q) = \int_{-\infty}^{x_q} f(x) dx = q$$

Diverse Verteilungen

Es folgt eine Sammlung von wichtigen Verteilungen und deren Eigenschaften

Stetige Gleichverteilung

- Dichtefunktion $f(x) = \frac{1}{b-a}$
- Erwartungswert $E(X) = \frac{b-a}{2}$

Dreiecksverteilung

Entsteht durch eine Zufallsvariable $S = X_1 + X_2$ wenn X_1, X_2 aus einer gleichverteilung stammen. Die Dichtefunktion ist kompliziert. Der Erwartungswert bleibt aber bei $E(S) = \frac{b-a}{2}$

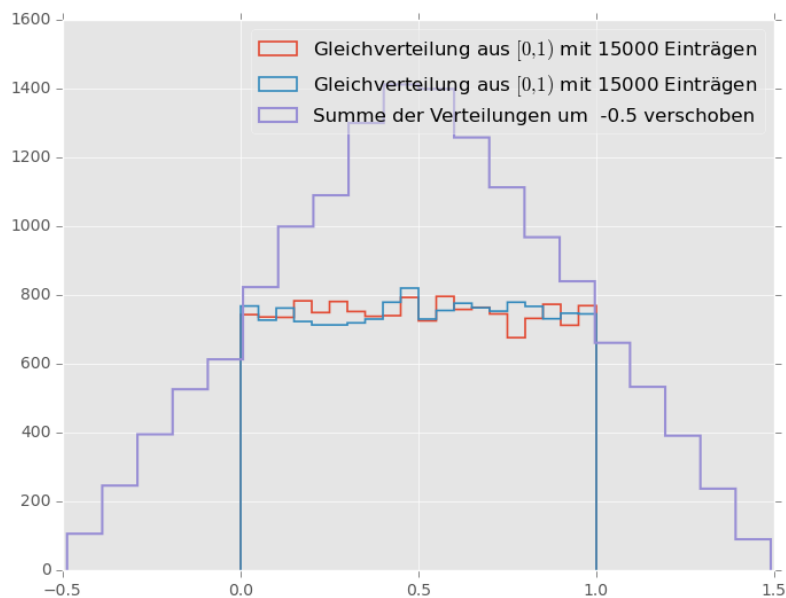


Figure 1: Dreiecksverteilung aus zwei Gleichverteilungen

Normalverteilung und Zentraler Grenzwertsatz

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Normalverteilung lautet

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}}$$

Dabei ist der Parameter μ der Erwartungswert und σ^2 die Varianz der Verteilung.

Wie bei jeder symmetrischen Verteilung sind alle ungeraden (zentralen) Momente der Verteilung gleich 0. Das zweite zentrale Moment der Verteilung ist logischerweise σ^2 . An dieser Stelle sollte man auf den [Zentralen Grenzwertsatz](#) hinweisen.

Binomialverteilung

Beschreibt die Wahrscheinlichkeit k Erfolge eines Bernoulli Prozesses mit der Erfolgswahrscheinlichkeit p und n Wiederholungen zu Messen

- Dichtefunktion $f(k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$
- Erwartungswert $E(X) = np$
- Varianz $Var(X) = np(1-p)$

Für große n nähert sich die Verteilung der Normalverteilung mit $\mu = np$ und $\sigma^2 = np(1-p)$

Die Poisson-Verteilung

- Dichtefunktion $f(k) = \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}$
- Erwartungswert $E(X) = \lambda$
- Varianz $Var(X) = \lambda$

Für große λ wird die Poisson Verteilung ähnlich zur Normalverteilung mit $\mu = \lambda$ und $\sigma^2 = \lambda$

Die χ^2 -Verteilung

Eine χ^2 -Verteilung mit n Freiheitsgraden entsteht aus der Summe von n quadrierten unabhängig standardnormalverteilten Zufallsvariablen Z_i^2 . Der einzige Parameter der Verteilung ist n . Dichte und Verteilungsfunktion sind komplizierte Ausdrücke mit Gamma Funktionen. Wichtig sind eher

- Erwartungswert $E(\chi_n^2) = n$

- Varianz t $Var(\chi_n^2) = 2n$

Die Summe von χ^2 Verteilungen ist wieder χ^2 verteilt.

t-Verteilung

Entsteht wenn der Mittelwert einer Normalverteilten Zufallsvariable, mit unbekannter Varianz, einer kleinen Stichprobe geschätzt wird.

Strebt für große Stichprobengrößen gegen die Gaußverteilung. Siehe ZGWS.

F-Verteilung

Ist der Quotient zweier χ^2 - Verteilungen. Wird für die Varianzanalyse benutzt.

Mehrdimensionales

Analog zum eindimensionalen Fall werden Quantile, Verteilungsfunktionen und Dichten beschrieben. Belassen wir es bei 2 Variablen lauten die wichtigsten Definitionen wie folgt.

Zunächst die Verteilungsfunktion

$$F(X, Y) = P(X < x, Y < y)$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(x, y) = \partial_x \partial_y F(X, Y)$$

Die Randverteilungen sind definiert als

$$g(x) = \int f(x, y) dy$$

$$h(y) = \int f(x, y) dx$$

Es lassen sich auch für stetige Zufallsvariablen bedingte Wahrscheinlichkeiten bzw. Dichten definieren.

$$f(x|Y = y) = \frac{f(x, y)}{h(y)}$$

$$f(y|X = x) = \frac{f(x, y)}{g(x)}$$

Und wie im 1D Fall gilt auch hier das X und Y unabhängig sind wenn $f(x, y) = g(x)h(y)$

$$f(x|Y = y) = \frac{f(x, y)}{h(y)} = g(x)$$

Wenn zwei Variablen unabhängig sind, dann sind sie unkorreliert. Das gilt nicht in die andere Richtung.

Der Erwartungswert der Zufallsvariablen X, Y mit der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, y)$ ist genau so definiert wie immer

$$E[g(X, Y)] = \int \int g(x, y) f(x, y) dx dy$$

Auch denkbar ist die Zusammenfassung von Zufallsvariablen zu einem Vektor $\vec{X} = (X_1, X_2, \dots)$ (auch häufig ohne den Vektorpfeil). Erwartungswerte und ähnliche Größen werden dann komponentenweise angewandt. Das Analogon zur Varianz ist die Kovarianzmatrix

$$Cov(\vec{X}) = E[(X - \mu)^T (X - \mu)]$$

Mehrdimensionale Normalverteilung

Vermutlich die mehrdimensionale Verteilung, die einem in der Praxis am häufigsten begegnet.

$$f(\vec{X}) = \frac{\det(C^{-1})^{1/2}}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{1}{2}(\vec{X} - \vec{a})^T C^{-1}(\vec{X} - \vec{a})}$$

Wobei C^{-1} das Inverse zur Kovarianzmatrix ist.

Transformation und Fehlerfortpflanzung

Transformieren man eine Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x), x \in \mathbb{R}^n$ mit $g(y) = x, g: \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ so gilt auch hier der [Transformationssatz](#)

$$\int_{g(\Omega)} f(x) dx = \int_{\Omega} f(g(y)) \det[Dg(y)] dy$$

mit der Determinante der Jacobi Matrix $Dg(y)$ an der Stelle y .

Im Blobel steht das ganze etwas salopp ungefähr so. Man verlangt eine “flächen-treue” Abbildung zwischen den Wahrscheinlichkeitsdichten $f_y(y)$ und $f_x(x)$ wenn eine Abbildung $g(y) = x$ gegeben ist.

$$f_y(y) = \sum_{\text{Zweige}} \frac{f_x(g(y))}{|dx/dy|}$$

Wie genau diese Definition zu verstehen ist weiß ich auch nicht. Vor allem da nach Transformationssatz die $g(y)$ eindeutig existieren muss glaub ich. Keine Ahnung.

Sei zum Beispiel ein Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x)$ gegeben zusammen mit einer Transformation $g(y) = \sqrt{y} = x$. Dann enthält Dg nur das Element $\frac{1}{2\sqrt{y}}$. Im Blobel passiert an dieser Stelle Magie. Egal!

Was bedeutet das für die Fehlerfortpflanzung. Eher unklar. Zunächst ist das Wort Fehlerfortpflanzung extrem gefährlich da Messfehler oder gar systematische sich Fehler unabhängig von der zugrunde liegenden Wahrscheinlichkeitsdichte der Messgröße propagieren. Wir können tatsächlich *nur* die Kovarianzmatrix transformieren. Diese können wir aus unseren Messungen natürlich schätzen.

Lineare Transformation

Allgemein gilt gegeben eine Zufallsvariable X mit Kovarianzmatrix V_X und eine lineare Abbildung $f = AX$, so gilt für die Transformation der Kovarianz

$$V_f = AV_X A^T$$

Auch wenn es keine Korrelationen in X gibt, V_X also Diagonal ist, so muss V_f nicht unbedingt Diagonal sein.

Der Erwartungswert ist eine lineare Abbildung. Demnach gilt:

$$E[f(X)] = E[AX] = AE[X]$$

Nicht lineare Transformation

Sei $f(X)$ irgendeine nicht-lineare Funktion die unsere Zufallsvariable X transformiert. Die Taylor Näherung in erster Ordnung um den Mittelwert μ lautet dann

$$f \approx f(\mu) + Df \cdot (x - \mu)$$

mit Jacobi Matrix Df . Die Konstante $f(\mu)$ hat keinen Einfluss auf die Kovarianz der Zufallsvariable in der Transformation. So ergibt sich die neue Kovarianzmatrix wie im linearen Fall oben wieder einfach zu

$$V_f = Df V_x Df^T$$

In der Vorlesung heißt die Matrix B und das ganze wird zur Großkreutzschen Formel:

$$V_f = B V_x B^T$$

In den allermeisten Fällen ist die Funktion f jedoch ein Skalarfeld. Zum Beispiel die indirekte Messung einer Größe durch zwei andere Größen, wie etwa den Widerstand über die Spannung und den Strom. Ein Beispiel mit einer Skalaren Funktion $f: \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ und einer zentrierten Zufallsvariable $X = (x, y)^T$ kann so aussehen:

$$f \approx f(0) + \text{grad } f \cdot X = f(0) + \frac{\partial f}{\partial x} x + \frac{\partial f}{\partial y} y$$

Da die Jacobi Matrix für skalare Felder zum Gradienten wird. Mit der Kovarianzmatrix

$$V_x = \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_y^2 \end{pmatrix}$$

folgt für die transformierte Varianz

$$\sigma_f^2 = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x^2 & \sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_y^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \\ \frac{\partial f}{\partial y} \end{pmatrix} = (\frac{\partial f}{\partial x})^2 \sigma_x^2 + (\frac{\partial f}{\partial y})^2 \sigma_y^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial y} \sigma_{x,y}$$

Diese Form ist auch als Gaußsche Fehlerfortpflanzung bekannt.

Schätzen

Schätzer werden benutzt um unbekannte Parameter der Grundgesamtheit die einer Messung zugrunde liegt zu berechnen. Seien beispielsweise Werte einer Messung normalverteilt mit unbekannten Parametern so lassen sich bei ausreichender Stichprobengröße Varianz und Mittelwert der Verteilung schätzen. Es gibt verschiedene Kenngrößen um Schätzer zu kategorisieren.

Sei $\hat{\theta}$ der geschätzte Wert zum wahren Wert θ .

- Der Schätzer heißt Erwartungstreu wenn $E[\hat{\theta}] = \theta$
- Der Schätzer hat den Bias wenn $B(\theta) = E[\hat{\theta}] - \theta$
- Den $MSE(\theta) = E[(\hat{\theta} - \theta)^2] = B(\hat{\theta})^2 + Var(\hat{\theta})$

So ist das arithmetische Mittel beispielsweise ein erwartungstreuer Schätzer für den wahren Mittelwert. Die einfache Formel für die Varianz dagegen ist verzerrt. Weshalb man häufig die korrigierte Stichprobenvarianz S^2 benutzt welche wieder Erwartungstreu ist.

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=0}^n (x_i - \bar{x})$$

Kleinste Quadrate Methode

Betrachtet man seine Messungen $x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)} \dots$ als Realisierung von Zufallsvariablen und möchte daraus die Parameter aus dem Parametervektor a eines funktionalen Zusammenhangs $y = f(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots; a) \in \mathbb{R}^N$ schätzen. Hier minimiert man einfach die Summe der Quadratabweichungen oder auch Residuen.

$$S = \min_a \sum_i (y_i - f_i(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots; a))^2 = \min_a \sum_i r_i^2 = \min_a \|y - f\|_2^2$$

Um das Residuum zu minimieren muss jede Komponente des Gradientens 0 werden

$$\frac{\partial}{\partial a_j} \sum (y_i - f_i(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots; a))^2 = -2 \sum r_i \frac{\partial f_i(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots; a)}{\partial a_j} \stackrel{!}{=} 0 \text{ für } j = 1 \dots m$$

Die Minimierung kann aber über beliebiges Verfahren erfolgen. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass man keine Annahme über die Verteilung der Zufallsvariablen machen muss.

Linear Least Squares Wichtiger Spezialfall sind jedoch Lineare Modelle. Die sich häufig analytisch lösen lassen. Also Funktionen $f = \sum_j a_j \phi_j(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots)$ die nur linear in den Parametern a_j sind. Die Ableitung wird so zu

$$X_{k,i} = \frac{\partial f_i(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots; a)}{\partial a_k} = \phi_{k,i}(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots)$$

Setzt man diesen Späß in die Gleichung der Ableitung ein kommt man auf die wichtige Matrixgleichung als Schätzer für a

$$(X^T X)^{-1} X^T y = \hat{a}$$

Auch die Quadratsumme der Residuen lässt sich in Matrixform schreiben und darin der Schätzer einsetzen.

$$S = (y - aA)^T(y - aA)$$

$$\hat{S} = y^T y - \hat{a}^T A^T y$$

Die Fehler auf die geschätzten Parameter a erhält wie zuvor aus der Transformation der Kovarianzmatrix V_y die wir aus unserer Messung gewinnen können.

$$V_{\hat{a}} = (X^T X)^{-1} X^T V_y ((X^T X)^{-1} X^T)^T$$

Ein wichtiger Spezialfall tritt ein, wenn es keine Korrelationen zwischen den Werten gibt. Dann wird die Matrix V_y Diagonal $V_y = \sigma^2 I$ und

$$V_{\hat{a}} = (X^T X)^{-1} \sigma^2.$$

Im nächsten Beispiel wurden Punkte aus einer zweidimensionalen Normalverteilung gezogen und eine Gerade der Form $f(x) = a_0 + a_1 x$ durch das Least Squares Verfahren wie es oben beschrieben ist angepasst.

Figure 2: OLS Fit

Weighted Linear Least Squares Manchmal ist es wünschenswert verschiedene Messungen seiner Stichprobe unterschiedlich zu gewichten. Im Optimalfall nimmt man dafür den Kehrwert der Varianz der Messung. Die ist in der Praxis aber eher selten bekannt. Aber häufig proportional zum gemessenen Wert.

Tikhonov Regularisierung Die bei der Schätzung auftretende Matrix $(X^T X)$ ist eventuell schlecht konditioniert oder im Extremfall sogar singulär. Um das zu vermeiden wird nicht direkt die Summe der Residuen minimiert sondern noch eine weitere Nebenbedingung gestellt die durch eine Matrix Γ ausgedrückt wird.

$$S = (y - aX)^T (y - aX) + \Gamma$$

Die Lösungsgleichung für die Parameter a wird dann zu

$$a = (X^T X + \Gamma^T \Gamma)^{-1} X^T y$$

Häufig möchte man zum Beispiel verlangen das die Norm des Parametervektors a klein bleibt. Dann wird aus der Tikhonov Matrix $\Gamma = \lambda a^T a$ mit $\lambda \in \mathbb{R}$.

Beispielrechnung aus der Übung

Gegeben sei das Modell $f = a_1 \cos(x) + a_2 \sin(x)$ wobei $f \in \mathbb{R}^N$ und N Messungen. Die Residuen $\|f - y\|_2^2$ sollen minimiert werden. Zunächst in Komponentenschreibweise

$$\sum_i (f_i(x, a) - y_i)^2 = \sum_i (a_1 \cos(x_i) + a_2 \sin(x_i) - y_i)^2$$

Das Residuum $r_i = a_1 \cos(x_i) + a_2 \sin(x_i) - y_i$ lässt sich in Matrixschreibweise hinschreiben als $r = Xa - y$. Mit der Matrix

$$X = \begin{pmatrix} \cos(x_1) & \sin(x_1) \\ \cos(x_2) & \sin(x_2) \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

.... TODO

Maximum Likelihood Methode

Man hat N unabhängige Messungen von Variablen (Vektoren) X_i als Realisierung einer Zufallsvariable mit bekannter Wahrscheinlichkeitsdichte $f(X_i, a)$ die von

dem Parametervektor a abhängt. Bei unabhängigen Ereignissen/Messungen ist die Wahrscheinlichkeit $P(X_i \cap X_j) = P(X_i)P(X_j)$. Mit der entsprechenden Wahrscheinlichkeitsdichte wird die sogenannte Likelihood-Funktion $L(a)$ definiert als

$$L(a) = f(X_1, a) \cdot f(X_2, a) \dots f(X_N, a)$$

Die Behauptung ist nun, dass die beste Schätzung für a die Likelihood-Funktion maximiert. Da diese Form der Likelihood aber etwas nervig zu optimieren ist, logarithmiert man das ganze.

$$l(a) = \ln(L(a)) = \sum_i \ln(f(X_i, a))$$

Dieser Ausdruck ist maschinell wesentlich einfacher zu optimieren

Fehler des geschätzten Wertes.

Nähert man die LogLikelihood-Funktion in der Nähe des geschätzten Wertes \hat{a} ergibt sich in zweiter Ordnung eine Parabel.

$$l(a) = l(\hat{a}) + \frac{1}{2} \cdot \left. \frac{d^2 l}{d^2 a} \right|_{\hat{a}} (a - \hat{a})^2 + \dots$$

Man beachte das $\frac{dl}{da}$ an der Stelle \hat{a} per Definition gleich 0 sein muss. Exponentiert man das ganze wieder erkennt man, dass die Likelihood-Funktion zu der LogLikelihood-Funktion tatsächlich Normalverteilt an dieser Stelle ist. Die Varianz lässt sich dann Ablesen zu

$$\sigma_{\hat{a}}^2 = \left(\left. \frac{d^2 l}{d^2 a} \right|_{\hat{a}} \right)^{-1}$$

Hat man mehrere Parameter ist die Kovarianzmatrix einfach das Inverse der Hesse Matrix.

Ein Beispiel mit der Poisson Verteilung Angenommen die Messungen folgen einer Poissonverteilung mit unbekanntem Parameter λ und es werden die Werte 13, 8 und 9 gemessen. Einsetzen in die Likelihood-Funktion ergibt

$$L(\lambda) = f(13, \lambda) f(8, \lambda) f(9, \lambda) = \frac{\lambda^{13}}{13!} e^{-\lambda} \frac{\lambda^8}{8!} e^{-\lambda} \frac{\lambda^9}{9!} e^{-\lambda}.$$

Das Maximum ergibt sich durch Ableiten

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} L(\lambda) = \frac{1}{13!8!9!} e^{-3\lambda} \lambda^{29} (30 - 3\lambda) \stackrel{!}{=} 0 \implies \hat{\lambda} = 10$$

Wie erwartet ist λ der Mittelwert der gemessenen Werte. Welcher bei einer Poissonverteilung natürlich allgemein auch eine Reelle Zahl sein darf.

Das ganze funktioniert äquivalent mit der LogLikelihood-Funktion $l(\lambda) = \ln(L(\lambda))$

$$l(\lambda) = \ln(f(12, \lambda)f(8, \lambda)f(9, \lambda)) = \ln(f(12, \lambda)) + \ln(f(8, \lambda)) + \ln(f(9, \lambda))$$

und deren Ableitung

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} l(\lambda) = -3 + \frac{30}{\lambda} \stackrel{!}{=} 0 \implies \hat{\lambda} = 10$$

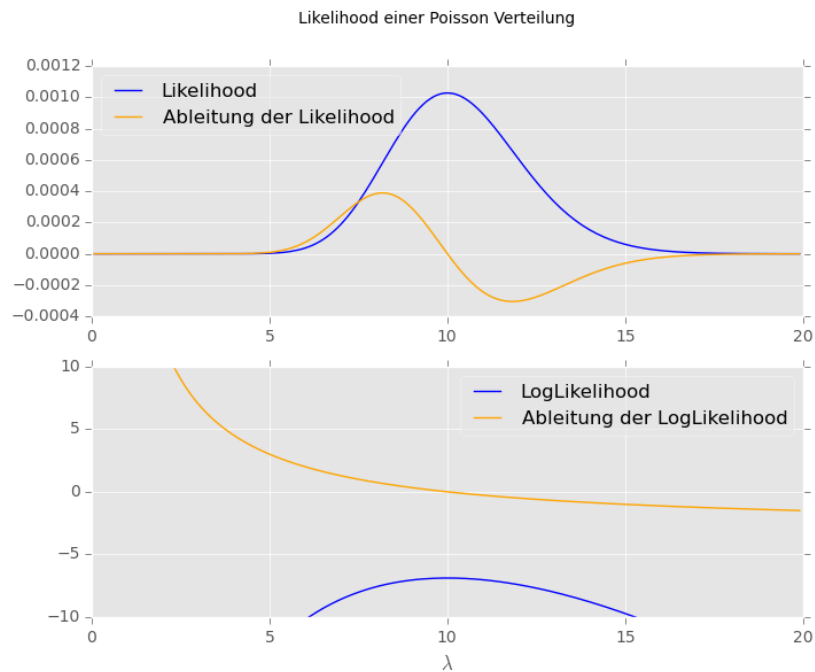


Figure 3:

Zufallszahlen und Verteilungen

Wichtige Kriterien für PRNGs nach Vorlesung lauten

- Reproduzierbarkeit. Sowieso gegeben bei deterministischen Rechnern
- Geschwindigkeit. Zumindest bei wissenschaftlichen Anwendungen wichtig. Bei Kryptographie ist das etwas subtiler.
- Periodenlänge. Also die Minimale Folgenlänge nach der sich die Zahlen wiederholen

Linear Congruential

Die defintion der folgenglieder erfolgt rekursiv aus dem vorherigen Element.

$$x_{n+1} = (ax_n + c) \mod M$$

Die maximal erreichbare Periodenlänge ist klarerweise M . Diese wird aber noch für bestimmte Werte von a und c erreicht. Nach Knuth gelten dafür folgende Bedingungen:

- c und M sind Teilerfremd
- $a - 1$ ist teilbar durch jeden Primfaktor von M
- Wenn M durch 4 teilbar ist, dann auch $a - 1$

Der Multiplicative Linear Congruential hat keinen Inkrement. Also $c = 0$. Die Periodenlänge ist immer kleiner als die des Linear Congruential. Er erreicht seine maximale Periodenlänge iff

- Der Startwert x_1 ist Teilerfremd zu M
- a ist primitives Element der Restklassengruppe $\mathbb{Z} \setminus M\mathbb{Z}_\times$. Also mit Multiplikation

Zum einfachen testen der Güte von Zufallszahlen könnte man einfach alle Zahlen Histogrammieren und prüfen ob eine Gleichverteilung entsteht. Das reicht aber nicht aus da evetnuell Lücken im Wertebereich nicht auffallen aufgrund des Binnings. Außerdem wird die Reihenfolge der Zahlen nicht getestet die ebenfalls korreliert sein kann. Bei Linearen Kongruenzgeneratoren kann man die Korrelation zwischen den Folgegliedern prüfen mittels Spektraltest. Dazu werden Tupel von Zahlen (zum Beispiel aufeinander folgende) aufgetragen. In -Aufgabe 13 von Blatt 4 sah das zum Beispiel so aus.

XOR-Shift

Dieser Algorithmus nutzt nur wenige XORs und Bitshifts während der Berechnung eines Folgengliedes und ist deshalb besonders effektiv auf entsprechender Hardware. Die Funktionsvorschrift der Variante aus der Vorlesung für eine Seed x lautet

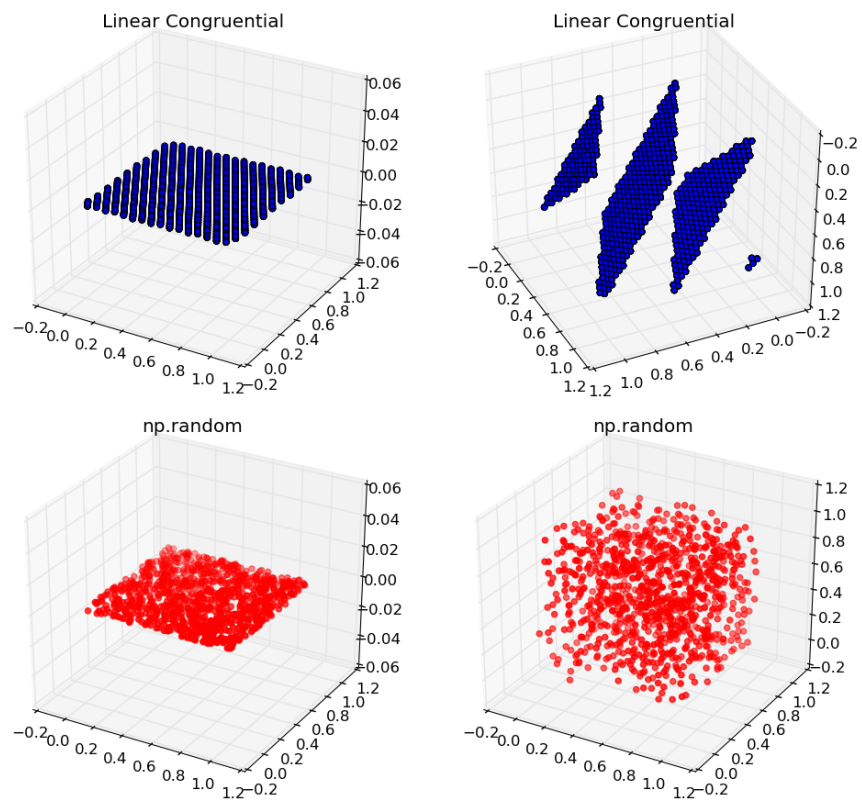


Figure 4: Spektral Plots

$$x = (y_i \ll a) \otimes x$$

$$x = (y_i \gg b) \otimes x$$

$$y_{i+1} = (y_i \ll c) \otimes x$$

Die 32-Bit version hat eine Maximale Periodenlänge von $2^{32} - 1$.

Mersenne Twister

Der Mersenne Twister ist ein weit verbreiteter Algorithmus mit ähnlicher Güte wie der XOR-Shift. Braucht 624 Startwerte und liefert pro durchlauf weitere 624 Zahlen.

Erzeugen beliebiger Verteilungen.

Die meisten PRNGs erzeugen gleichverteilte Zahlen. In der Praxis braucht man aber meistens Zahlen aus anderen Verteilungen. Es je nach Zielverteilung verschiedene Methoden um das zu erreichen.

Neumansches Rückweisungsverfahren (Rejection Method)

Ziehe zunächst Paare von Zufallszahlen (x_r, y_r) aus dem Definitionsbereich einer gegebene Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x)$. Bilde nun für all x_r die $y_{r,neu} = f(x_r)$. Falls $y_r < y_{r,neu}$ behalte x_r andernfalls verwirfe das Zahlenpaar.

Das Verfahren ist relativ einfach zu handhaben und funktioniert für beliebige Verteilungen. Die Laufzeit ist dafür natürlich eher schlecht da viele Zahlen verworfen werden. Besonders in höher dimensional Räumen ist das ein Problem da das Volumen unter der Kurve der Wahrscheinlichkeitsdichte kleiner wird.

Im Mittel wird so nur jede

$$Q = \frac{\int_{\Omega} f d\Omega}{\Omega}$$

Zahl genutzt.

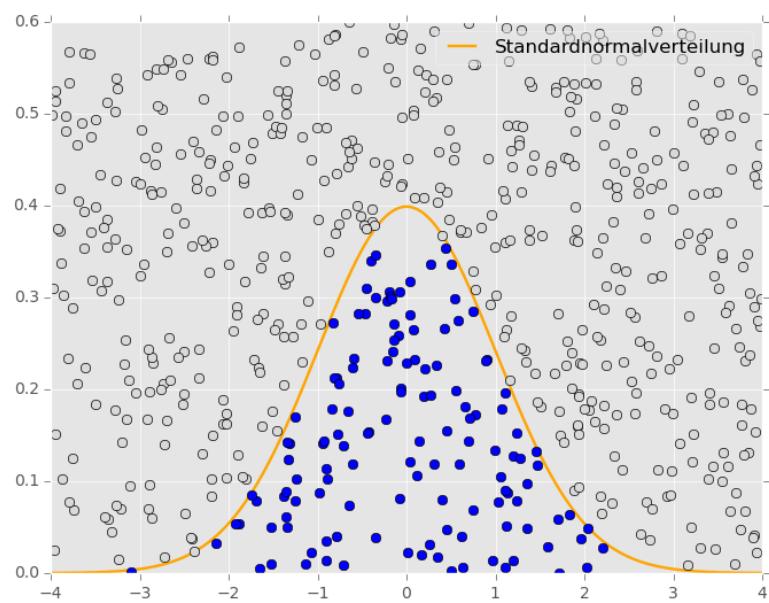


Figure 5: Rückweisung vieler Punkte

Transformationsmethode

Angenommen eine stetige Verteilungsfunktion $F(x)$ besitzt eine Umkehrfunktion und U sei eine auf dem Intervall $[0, 1]$ gleichverteilte Zufallsvariable. Dann genügt $X := F^{-1}(U)$ der Verteilungsfunktion $F(X)$ wenn F^{-1} die bekannte Quantilsfunktion ist. Siehe abschnitt weiter oben.

Generation von Zufallszahlen im Bereich von 0 bis π , die der Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x)=\sin(x)$ folgen

Das ist nun leider keine Wahrscheinlichkeitsdichte. Dafür aber $f(x) = \frac{\sin(x)}{2}$.

Bestimme also zunächst die Verteilungsfunktion $F(x) = \int_{-\infty}^x f(x)dx$ in dem Definitionsbereich von $[0, \pi]$

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{\sin(x)}{2} dx = \frac{1 - \cos(x)}{2}$$

Dann folgt für $F^{-1}(U)$ nämlich (also nicht wie im Skript. Da is es falsch)

$$X = F^{-1}(U) = \arccos(1 - U \cdot 2)$$

Das funktioniert auch. Beweis durch Plot.

Erzeugung Normalverteilter Zahlen

Da die Verteilungsfunktion der Normalverteilung oder deren Inverse nicht mehr analytisch aufgeschrieben werden kann, funktioniert die Inversionsmethode hier nicht. Stattdessen nutzt man die Box Muller Methode oder die Polarmethode. Das sind zwei ähnliche aber doch unterschiedliche Algorithmen. In der Vorlesung steht ganz seltsames Zeug dazu. Da scheinen beide Methoden vermischt zu werden.

Beide Verfahren beruhen auf dem Polarkoordinaten Trick zur Berechnung des Gaußintegrals. Um die Inversionsmethode anwenden zu können bräuchte man einen analytischen Ausdruck für die Verteilungsfunktion der Normalverteilung. Die gibt es aber nicht. Da das Integral

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$$

nicht ohne weiteres lösbar ist.

Das Produkt von zwei Gaußintegralen lässt sich allerdings doch integrieren.

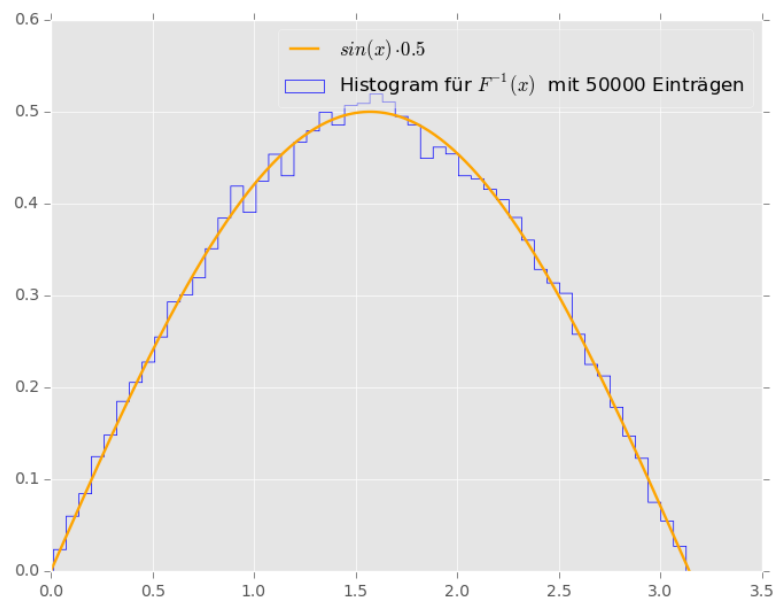


Figure 6: Inversionsmethode

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{2}} dy$$

$$I^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2}} dx dy$$

In Polarkoordinaten folgt.

$$I^2 = \int_0^{\infty} \int_0^{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}} r dr d\varphi = 2\pi \int_0^{\infty} e^{-\frac{r^2}{2}} r dr = 2\pi$$

Box Muller Methode Ziehe zunächst gleichverteilte Zufallszahlen u_1, u_2 aus dem Intervall $[0, 1]$. Für die Inversions Methode muss eine Verteilungsfunktion bestimmt werden. Betrachten wir also die neue Wahrscheinlichkeitsdichte $f(x, y) = e^{-\frac{(x^2+y^2)}{2}} \cdot \frac{1}{2\pi}$. Also das Produkt aus zwei Normalverteilungen.

Nach der Transformation in Polarkoordinaten wie oben erkennt man, dass der Polarwinkel φ gleichverteilt im Intervall $[0, 2\pi]$ ist da die Verteilung radialsymmetrisch ist. Entsprechend kann dieser Parameter schonmal erzeugt werden durch

$$\varphi = 2\pi u_1$$

Übrig bleibt der Radius R. Mit der Definition der Verteilungsfunktion folgt also das Integral

$$F(R) = \int_0^R e^{-\frac{r^2}{2}} r dr = 1 - e^{-\frac{R^2}{2}}$$

Und die Umkehrfunktion $F^{-1}(u_2) = \sqrt{-2 \ln(1 - u_2)}$ die sich äquivalent schreiben lässt als $F^{-1}(u_2) = \sqrt{-2 \ln(u_2)}$ da die Verteilungen $1 - u_2$ und u_2 gleich sind. In kartesischen Koordinaten folgt demnach

$$z_x = R \cdot \cos(\varphi) = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \cos(2\pi u_2)$$

$$z_y = R \cdot \sin(\varphi) = \sqrt{-2 \ln(u_1)} \sin(2\pi u_2)$$

Der Grund für die Erzeugung von Zahlenpaaren ist auch technischer natur. So lassen sich auf vielen Prozessoren der Cosinus und der Sinus für ein Register parallel mit einer einzigen Assemblerinstruktion berechnen.

Marsaglia's Polar Method Hierbei werden die Bestimmung der trigonometrischen Ausdrücke überflüssig. Was eventuell zur schnelleren Ausführung hilft. Hier der [Algorithmus wie in der Wikipedia](#) beschrieben ist:

1. Erzeuge zwei voneinander unabhängige, gleichverteilte Zufallszahlen u, v im Intervall $[-1, 1]$
2. Berechne $q = u^2 + v^2$. Falls $q = 0$ oder $q \geq 1$, gehe zurück zu Schritt 1.
3. Berechne $p = \sqrt{\frac{-2 \cdot \ln q}{q}}$.

$x_1 = u \cdot p$ und $x_2 = v \cdot p$ sind nun zwei voneinander unabhängige, standardnormalverteilte Zufallszahlen.

Erzeugung χ^2 -verteilter Zahlen.

Ein Wikipedia sagt mehr als 1000 worte:

Für gerade $n=2m$ kann man die χ_n^2 -Verteilung als m -fache Faltung bilden mit Hilfe der gleichmäßig stetigen Dichte $U(0, 1)$:

$$\chi_n^2 = -2 \ln \left(\prod_{i=1}^m u_i \right) = -2 \sum_{i=1}^m \ln(u_i),$$

worin die u_i m unabhängige gleichmäßig stetig verteilte Zufallsvariablen sind.

Für ungerade n gilt dagegen

$$\chi_n^2 = \chi_{n-1}^2 + [\mathcal{N}(0, 1)]^2.$$

Beweis erfolgt mal wieder durch Plot.

Trennen von Datensätzen

Im weiteren beschränken wir uns auf binäre Entscheidungsprobleme.

Unsere Daten bestehen aus N Beobachtungen $\vec{X}^{(i)}$ wobei jede Vektorkomponente \vec{X}_k eine Eigenschaft/Feature/Parameter oder auch Attribut codiert. Jede Komponente ist also die Realisierung einer Zufallsvariable. Die Trainingsmenge sind die Tupel (\vec{X}, Y) wobei Y die Zufallsvariable ist, welche die Klassenzugehörigkeit codiert. Das Klassenlabel wird häufig den Werten 0 oder 1 codiert.

Dafür gibt es diverse Verfahren. Allen gemeinsam ist die Messung der Trennungsqualität über die Zahlen aus der ConfusionMatrix. Um statistische Fehler

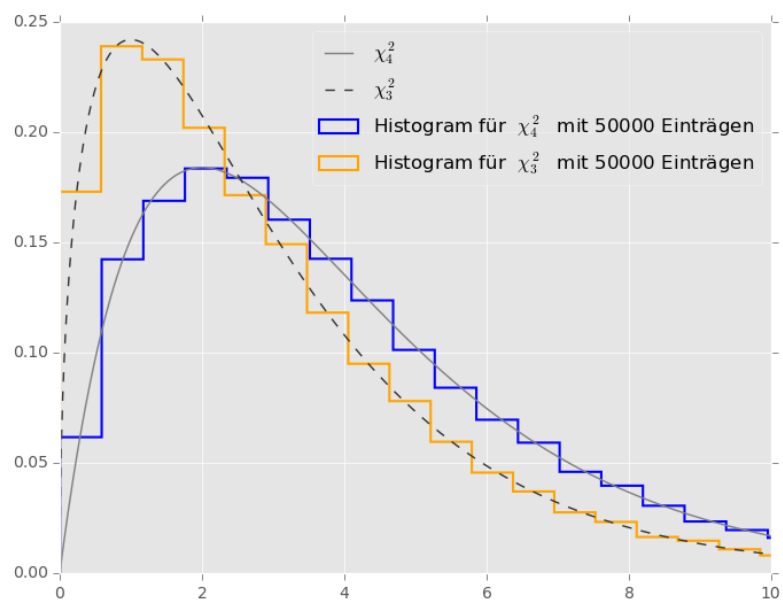


Figure 7: Leckere Zahlen

zu bekommen und Overfitting zu vermeiden werden Resampling Methoden wie k-Fold Cross Validation und Bootstrapping verwendet. Bei maschinellen Lernverfahren wird allgemein zwischen Supervised und Unsupervised Methoden unterschieden.

Lineare Fisher Diskriminanz

Vorsicht. Allgemeine LDA und Fisher Diskriminanz machen unterschiedliche Annahmen an die Varianzen in den Klassen. Wird aber häufig nicht unterschieden.

Die Entscheidungsfunktion für irgendeine Beobachtung $\vec{X}^{(i)}$ bei LDA sieht allgemein einfach so aus:

$$\vec{w} \cdot \vec{X}^{(i)} > c$$

Sei V die Kovarianzmatrix aller Daten und V_Y die Kovarianzmatrix nur der Daten, die zur Klasse Y gehören. Zunächst in Komponentenschreibweise

$$V_{k,l} = \frac{1}{N} \sum_N (\vec{X}_k - \mu_{\vec{X}_k})(\vec{X}_l - \mu_{\vec{X}_l})$$

Wenn \underline{X} die Matrix aller Beobachtungen ist und $\underline{\mu_x}$ die Matrix der Mittelwerte für jedes Feature (die erste Zeile Wiederholt sich) dann gilt in Matrix schreibweise

$$V = \frac{1}{N} (\underline{X} - \underline{\mu_x})^T \cdot (\underline{X} - \underline{\mu_x})$$

Der Gewichtsvektor \vec{w} wird dann gebildet mit

$$\vec{w} = (V_0 + V_1)^{-1} (\underline{\mu_{x,0}} - \underline{\mu_{x,1}})$$

Wie die Schwelle c definiert ist, ist nicht ganz eindeutig und sollte je nach Problem unterschiedlich gewählt werden. Falls sich die Verteilungen für die Klassen der $c \cdot \vec{w}$ Projektion einigermaßen ähnlich sehen so ist nach [Wiki](#) folgende Wahl gut

$$c = \vec{w} \cdot \frac{1}{2} (\vec{\mu_{x,y_1}} + \vec{\mu_{x,y_2}})$$

Häufig möchte man die Projektion auch einfach nur Plotten und eine Schwelle festlegen. Folgendes Beispiel soll das Illustrieren.

```
import numpy as np
from sklearn.datasets import make_classification
```

```

X, Y = make_classification(n_samples=1000, n_features=10, n_redundant=0, n_informative=4,
                           n_clusters_per_class=1)

class_1 = X[Y == 1]
class_2 = X[Y == 0]

mu_1 = np.mean(class_1, axis=0)
mu_2 = np.mean(class_2, axis=0)

variance_1 = np.dot((class_1 - mu_1).T, (class_1 - mu_1))
variance_2 = np.dot((class_2 - mu_2).T, (class_2 - mu_2))

weights = np.dot( np.linalg.inv(variance_1 + variance_2) , (mu_2 - mu_1))

c = np.dot(weights , (mu_1 + mu_2)) * 0.5

```

Das führt zu folgendem Plot

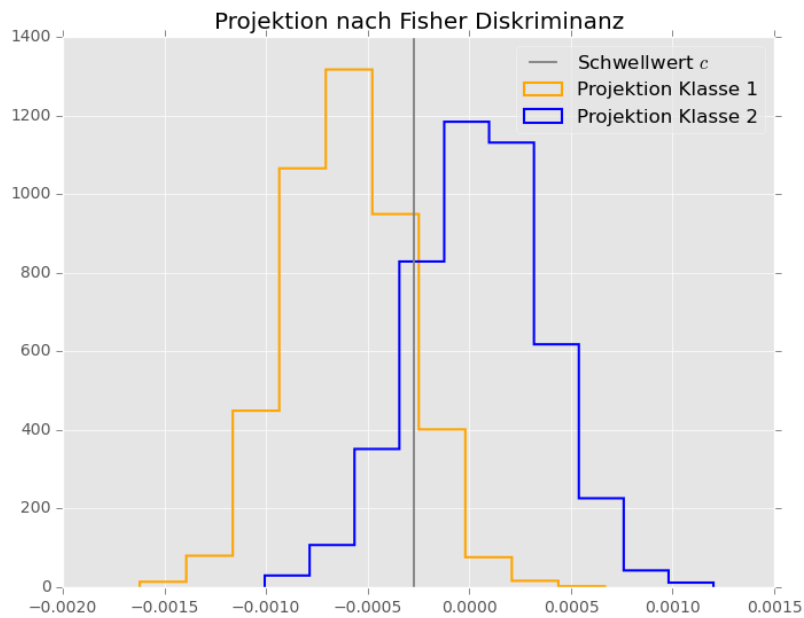


Figure 8:

Naive Bayes

Ist tatsächlich wesentlich komplizierter als in der Vorlesung geschrieben. Was da steht macht auch mal wieder nicht ganz so viel Sinn. Wichtig ist das bei dieser Methode eine Wahrscheinlichkeitsdichte angenommen werden muss aus der die Messwerte kommen. Für nominale Werte könnte man eine Gleichverteilung annehmen. Das geht nur solange gut wie man die Gleichverteilung aus den Trainingsdaten schätzen kann. Für ein neuen Wert der noch nicht im Trainingsdatensatz vorhanden war geht das natürlich schief.

k-NN - Regression und Klassifikation

Alles was man benötigt ist eine Metrik d auf dem Parameterraum um Abstände zu bestimmen. Gegeben ein unklassifiziertes Beispiel \vec{X}_{Neu} und eine Trainingsmenge aus Tupeln (Y, \vec{X}) bestimme im Fall der Regression den Mittelwert der k nächsten Nachbarn zu \vec{X}_{Neu}

$$Y_{\text{Neu}} = \frac{1}{k} \sum_{k \text{ Nächste Nachbarn}} Y_i$$

Falls eine Klassifikationsaufgabe gelöst werden soll wird das häufigste Label der nächsten Nachbarn verwendet.

gegensätzlich zur Behauptung aus der Vorlesung und der Übung müssen die Daten dafür **nicht** sortiert werden. Entsprechend schwierig wird ein Laufzeitvergleich.

Entscheidungsbaum Algorithmen

Im folgenden Abschnitt sind alle Einheiten in Bits. Es wird also der Logarithmus Dualis verwendet.

Da Entscheidungsprozesse in logischer Syntax für Menschen etwas schwer zu lesen sind gibt es die wunderbare Darstellung als Baum. Interessant ist die automatische Generierung der Entscheidungsfunktion an den Knoten eines Baumes aus Trainingsbeispielen. An jedem Knoten muss ein Attribut ausgewählt werden anhand dessen die Trainingsmenge in Teilmengen aufgeteilt wird. Es soll das *wichtigste* Attribut ausgewählt werden. Das passiert in den allermeisten Fällen über die Größe namens **Information Gain**.

Für eine Zufallsvariable Y mit dem Alphabet Z (also alle möglichen Werte der Codierung) ist die Entropie definiert als der Erwartungswert der Information

$$H(Y) = - \sum_{z \in Z} P(Y = z) \log_2 P(Y = z).$$

Der Information Gain ist definiert als die Änderung der Entropie der Zielvariable Y bedingt einer weiteren Zufallsvariable X . Also einer Komponente aus unserem Datenvektor.

$$IG(Y, X) = H(Y) - H(Y|X).$$

Mit der bedingten Entropie

$$\begin{aligned} H(Y|X) &= \sum_{m \in M} P(X = m) H(Y|X = m) \\ &= - \sum_{m \in M} P(X = m) \sum_{z \in Z} P(Y = z|X = m) \log P(Y = z|X = m) \end{aligned}$$

Ganz grob gesprochen sagt diese Größe aus wieviel Information bezüglich der Zielvariable gewonnen wird wenn man den Wert des Attributes X kennt. Man wählt also dasjenige Attribut aus mit dem der IG am größten ist.

Bei kontinuierlichen Attributwerten, also bei Reellen Zufallsvariablen X , können die Daten anhand eines Schnittes in zwei Teilmengen aufgeteilt werden. Um den richtigen Schnitt zu finden wird einmal über jeden Attributwert aus der Trainingsmenge iteriert und der IG für jeden Wert bestimmt. Es sei darauf hingewiesen das die Entropie wie sie hier definiert ist natürlich nur für Zufallsvariablen gilt die diskrete Werte annehmen. Wir können den Trick nur anwenden weil unsere Daten immer abzählbar bleiben.

Ensemble Methoden (Bagging)

TODO

Random Forest TODO

Dimensionsreduktion

Hauptkomponentenanalyse, PCA

Wird vor allem zur Dimensionsreduzierung verwendet. Datensätze mit mehreren tausend Attributen treten zum Beispiel in der Bildverarbeitung (siehe auch Eigenfaces) und der Biologie häufig auf. Oft sind viele dieser Attribute extrem korreliert und können quasi *zusammengefasst* werden. Ziel der PCA ist es die Achse im Raum zu finden entlang derer die Varianz am größten ist. Das wird die erste Hauptkomponente genannt. Die zweite Hauptkomponente ist entsprechend die Achse mit der zweitgrößten Varianz etc. Klingt kompliziert lässt sich aber einfach durch Eigenwertzerlegung bestimmen. Die tatsächliche Theorie dahinter

kann beliebig kompliziert werden. Hier wird nur das Verfahren und das Resultat erläutert.

Seien zunächst o.B.d.A. N **zentrierte** Zufallsvariablen $\vec{X}^{(i)}$ als Datenmatrix \underline{X} gegeben.

1. Berechnung der Kovarianzmatrix der Daten $C = \frac{1}{N-1} \underline{X}^T \underline{X}$
2. Diagonalisiere C durch Zerlegung in $V^{-1} C V = D$ mit beliebiger Methode. In V stehen jetzt also die Eigenvektoren $\vec{V}^{(i)}$
3. Transformiere die Datenmatrix in die Eigenbasis der Kovarianzen $\vec{Z}^{(i)} = \underline{X} \vec{V}^{(i)}$

Zur Reduktion der Dimension behalte man nur die $\vec{Z}^{(i)}$ zu den Eigenvektoren $V^{(i)}$ deren Eigenwerte größer als ein bestimmter Schwellwert war.

Die PCA eines 2D Gauß kann zum Beispiel so aussehen.

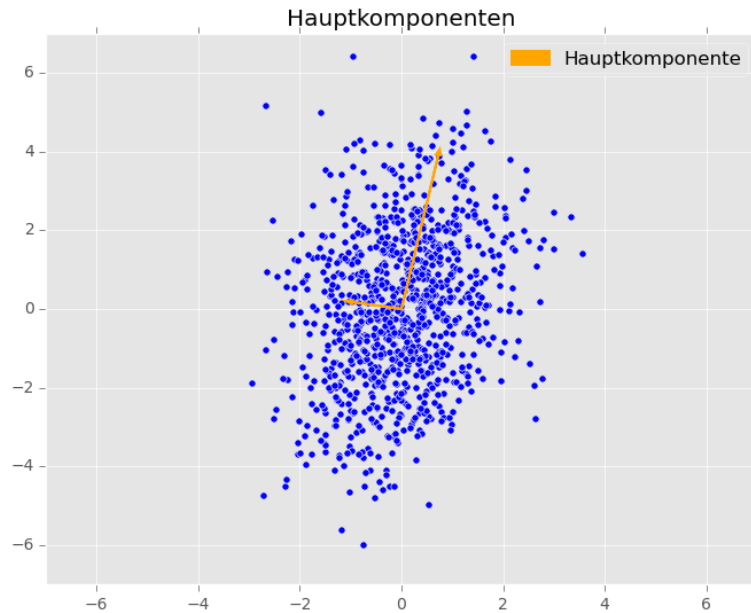


Figure 9:

MRMR

Wat soll man dazu sagen?

Statistische Tests

TODO

Kolgomorov Smirnov Wodka Test

χ^2 -Test

Likelihood-Quotiente Test