```
#> Error in contrib.url(repos, "source"): trying to use CRAN without setting a mirror
```

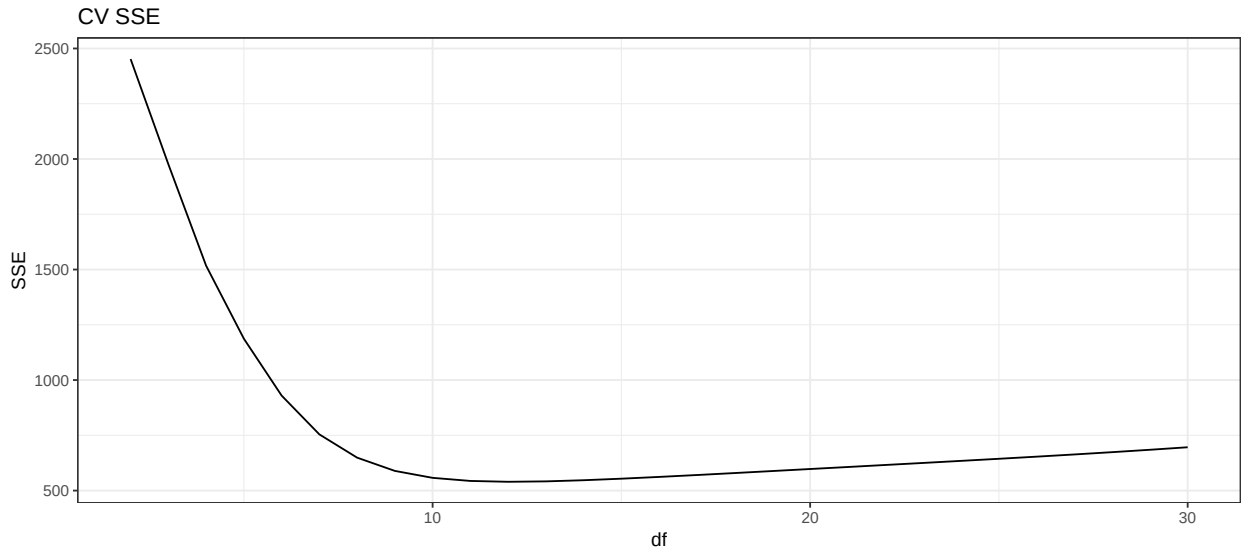
Praktikum 9

A1

e)

Wir führen im Folgenden eine Parametrisierung für die effective degrees of freedom des smoothing Splines durch. Dabei variieren wir den Wert von 2 bis 30 und untersuchen anschließend anhand einer Grafik, welcher Wert den geringsten Fehler liefert. Den Fehler berechnen wir mit Hilfe einer Leave One Out Cross Validations (siehe Option `cv = TRUE`).

```
# remove duplicated values for cross validaton:
my_data <- mcycle
my_data <- my_data[!duplicated(my_data$times), ]

k <- 30
sse_ <- c()
for(j in 2:k) {
  smspl <- smooth.spline(x=my_data$times, y=my_data$accel, df=j, cv=TRUE)
  sse_ = append(sse_, smspl$cv.crit)
}
df_res_ = data.frame(df=2:k, SSE=sse_)

df_res_ %>%
  ggplot(., aes(x=df, y=SSE))+
  geom_line()+ ggtitle("CV SSE") +
  theme_bw()
```



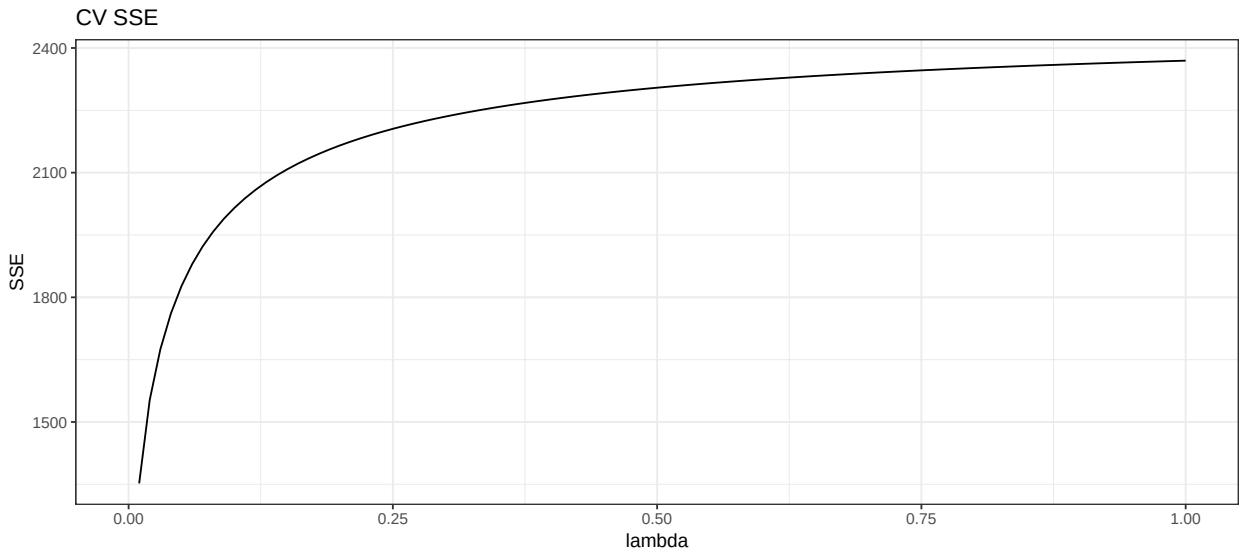

```
smsplDf <- smooth.spline(x=my_data$times, y=my_data$accel, df=10)
lambda = smspl$lambda
```

Der optimale Wert für die effektive degrees of freedom ist laut Grafik 10. Wir erhalten $\lambda \approx 1.2641699 \times 10^{-6}$.

f)

In diesem Aufgabenteil variieren wir den Wert für λ eines Smoothing Spline und ermitterln anschließend den besten Parameter erneut mit LOOCV.

```
lamb <- seq(0.0,1, 0.01)

sse_ <- c()
for(j in lamb) {
  smspl <- smooth.spline(x=my_data$times, y=my_data$accel, lambda=j, cv=TRUE)
  sse_ = append(sse_, smspl$cv.crit)
}
df_res_ = data.frame(lambda=lamb, SSE=sse_)

df_res_ %>%
  ggplot(., aes(x=lambda, y=SSE))+
  geom_line()+ ggtitle("CV SSE") +
  theme_bw()
```




```
smsplLamb <- smooth.spline(x=mcycle$times, y=mcycle$accel, lambda=0.0)
degf = round(smspl$df, 2)
```

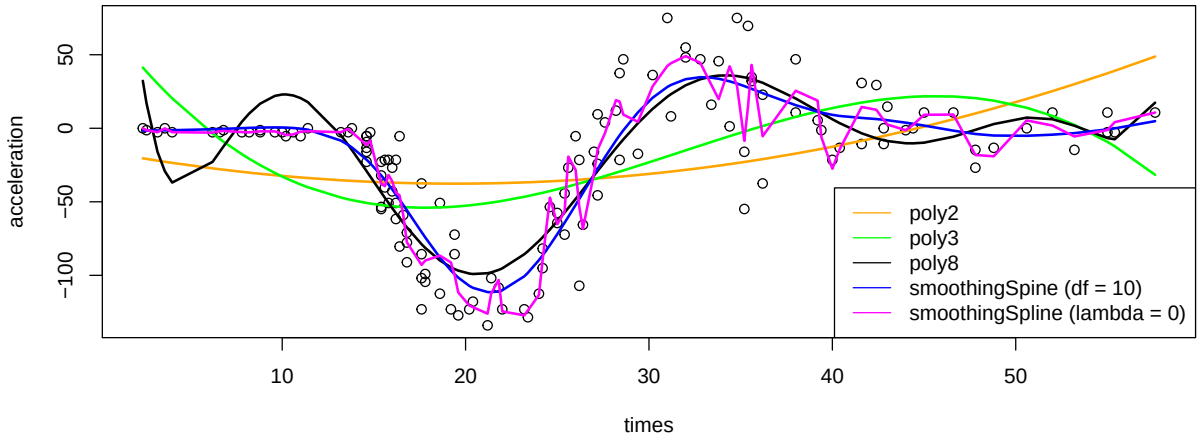
Wenn wir den Smoothing Spline in Abhähngigkeit von λ optimieren, erkennen wir auf der Grafik, dass der kleinstmögliche Wert für $\lambda = 0$ der Optimale ist. Der Wert für den effective degree of freedom beträgt in diesem Fall etwa 2.18 und damit geringer als in "e)".

g)

Jetzt vergleichen wir die beiden parametrisierten Smoothing Spline Modelle mit den polynomialen (Grad $2, 3, 8$) aus Aufgabenblatt 7 vergleichen.

```
poly2 <- lm(data=mcycle, accel ~ poly(times, 2))
poly3 <- lm(data=mcycle, accel ~ poly(times, 3))
```

```r
poly8 <- lm(data=mcycle, accel ~ poly(times, 8))

plot(mcycle$times, mcycle$accel, xlab="times", ylab="acceleration")
lines(mcycle$times, predict(poly2), type="l", col="orange", lwd=2)
lines(mcycle$times, predict(poly3), type="l", col="green", lwd=2)
lines(mcycle$times, predict(poly8), type="l", col="black", lwd=2)
lines(my_data$times, predict(smsplDf)$y, type="l", col="blue", lwd=2)
lines(my_data$times, predict(smsplLamb)$y, type="l", col="magenta", lwd=2)

legend("bottomright",
       legend=c("poly2", "poly3", "poly8", "smoothingSpine (df = 10)", "smoothingSpline (lambda = 0)"),
       col=c("orange", "green", "black", "blue", "magenta"),
       lty=1, lwd=1)
```



- $\lambda = 0$: Die Kurve verläuft nicht glatt durch die Trainingsdaten und neight zur Interpolation. Der Verlauf entspricht, nach Sichtprüfung, etwa dem der Punkte.
- df = 10: Die Kurve läuft glatt durch die Punkte und der Verlauf entsprcht etwa dem der Punkte.
- Die anderen drei Polynome sind glatt, aber der Verlauf der Punkte wird insbesondere an den Ecken nicht sinnvoll wiedergegeben.

Das beste Ergebnis nach Sichtprüfung erzielt der Smoothing Spline mit df = 10.

A2

a)

Sei λ fest.

$$\hat{f}(x) = \left(\sum_{i=1}^{n} K_\lambda(x, x_i) y_i\right) \left(\sum_{i=1}^{n} K_\lambda(x, x_i)\right)^{-1}$$

Der Tricube-Kern ist definiert als

$$K_\lambda(x, x_i) = \begin{cases} \left(1 - \left|\frac{x - x_i}{\lambda}\right|^3\right)^3, & |x - x_i| \leq \lambda \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für x_i fest ist $K_\lambda(x, x_i)$ für jedes x_i ohne $|x - x_i| = \lambda$ als Verknüpfung differenzierbarer Funktionen differenzierbar. Folglich bleiden die Punkte

$$|x - x_i| = \lambda \implies x_0 = \lambda + x_i \text{ und } x_0 = x_i - \lambda$$

als kritische Stellen auf Stetigkeit zu prüfen. Der Kern ist offensichtlich stetig in x_0, da der Wert beidseitig problemlos gegen 0 konvergiert. Wir prüfen die Differenzierbarkeit:

Sei $x_0 = \lambda + x_i$.

$$\lim_{h \to 0} = \frac{1}{h} \left(\left(1 - \left|\frac{\lambda + x_i - x_i + h}{\lambda}\right|^3\right)^3 - \left(1 - \left|\frac{\lambda + x_i - x_i}{\lambda}\right|^3\right)\right) \tag{1}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{h} \left(\left(1 - \left|1 + \frac{h}{\lambda}\right|^3\right)^3 - (1 - 1)^3 \right) \tag{2}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{h} \left(1 - \left(1 + \frac{h}{\lambda}\right)^3\right)^3 \tag{3}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{h} \left(1 - \left(1 + 3\frac{h}{\lambda} + 3\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^3}{\lambda^3}\right)^3\right)^3 \tag{4}$$

$$= \lim_{h \to 0} \frac{1}{h} \left(3\frac{h}{\lambda} + 3\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^3}{\lambda^3}\right)^3 = 0 \tag{5}$$

und der linksseitige Beweis $(-h)$ folgt analog.

Sei $x_0 = x_i - \lambda$.

$$\lim_{h\to 0} = \frac{1}{h}\left(\left(1-\left|\frac{x_i-\lambda-x_i+h}{\lambda}\right|^3\right)^3 - \left(1-\left|\frac{-\lambda+x_i-x_i}{\lambda}\right|^3\right)\right) \tag{6}$$

$$= \lim_{h\to 0}\frac{1}{h}\left(\left(1-\underbrace{\left|-1+\frac{h}{\lambda}\right|^3}_{<0 \text{ für } h\to 0}\right)^3 - (1-1)^3\right) \tag{7}$$

$$= \lim_{h\to 0}\frac{1}{h}\left(1-\left(1-\frac{h}{\lambda}\right)^3\right)^3 \tag{8}$$

$$= \lim_{h\to 0}\frac{1}{h}\left(1-\left(1-3\frac{h}{\lambda}+3\frac{h^2}{\lambda^2}-\frac{h^3}{\lambda^3}\right)^3\right)^3 \tag{9}$$

$$= \lim_{h\to 0}\frac{1}{h}\left(-3\frac{h}{\lambda}+3\frac{h^2}{\lambda^2}-\frac{h^3}{\lambda^3}\right)^3 = 0 \tag{10}$$

und der linksseitige Beweis $(-h)$ folgt analog.

Somit ist $K_\lambda(x, x_i)$ stetig differenzierbar und folglich ist $\hat{f}(x)$ ist Verkettung differenzierbarer Funktionen differenzierbar.

b)

Nimmt man nun den Epanechnikov Kernel

$$K_\lambda(x, x_i) = \begin{cases} \frac{3}{4}\left(1-\left(\frac{x-x_i}{\lambda}\right)^2\right), & |x-x_i| \le \lambda \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

dann sieht man, dass der Beweis der differenzierbarkeit analog verläuft. Der einzige nennenswerte Unterschied ist der Wegfall der beiden kubischen Potzen zu einer quadratischen Potenz.

Somit bleibt in Schritt (10) ein Term der Form

$$\lim_{h\to 0}\frac{1}{h}a\left(b\frac{h}{\lambda}+c\frac{h^2}{\lambda^2}\right), \quad a,b,c\in\mathbb{R}$$

und dieser konvergiert wieder problemlos gegen 0 und wir erhalten die Differenzierbarkeit.

c)

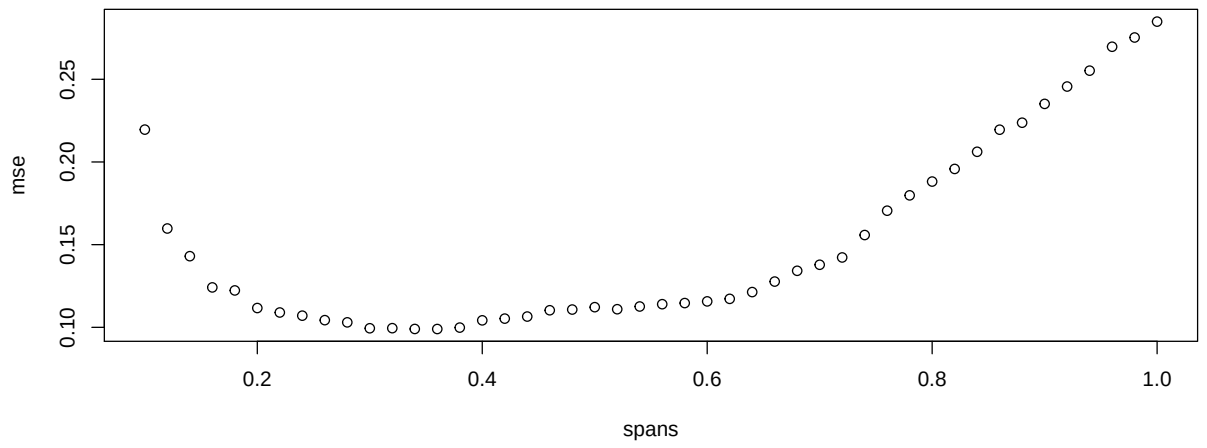
Ersetzen wir im Beweis der Differenzierbarkeit alle Vorkommen von λ durch eine variable Funktion $h_\lambda(x) > 0$, so verändert sich im Beweis nichts grundlegen. Die Limiten konvergieren und der Kernel Smoother bleibt differenzierbar.

A3)

```
set.seed(1337)
```

a)

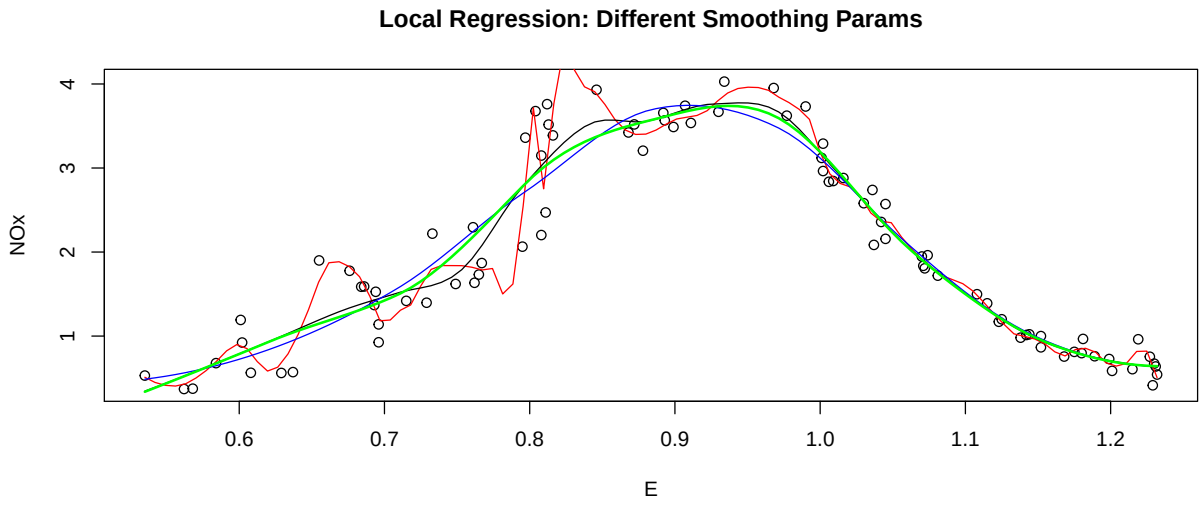
```
data(ethanol)

loessMod10 <- loess(NOx ~ E, data=ethanol, span=0.1) # 10% smoothing span
loessMod30 <- loess(NOx ~ E, data=ethanol, span=0.3) # 25% smoothing span
loessMod50 <- loess(NOx ~ E, data=ethanol, span=0.5)

spans = seq(0.1, 1, 0.02)

#Randomly shuffle the data
data <- ethanol[sample(nrow(ethanol)),]
#Create 10 equally size folds
folds <- cut(seq(1,nrow(data)),breaks=5,labels=FALSE)
#Perform 10 fold cross validation
test <- matrix(NA, ncol=2, nrow = length(spans))
mse1 <- c()
for (span in spans){
  mse <- c()
  for(j in 1:5){
    #Segement your data by fold using the which() function
    testIndexes <- which(folds==j,arr.ind=TRUE)
    testData <- data[testIndexes, ]
    trainData <- data[-testIndexes, ]
    #Use the test and train data partitions however you desire...

    fit <- loess(NOx ~ E, data=trainData, span=span, control = loess.control(surface="direct"))

    y.pred <- predict(fit, newdata = testData$E)
    y.true = testData$NOx

    mse <- append(mse, mean((y.pred-y.true)^2))

  }
  mse1 <- append(mse1, mean(mse))
}

test <- NULL
test$spans <- spans
test$mse <- mse1
test <- as.data.frame(test)

plot(test)
```




```
opt_spans <- test$spans[test$mse == min(test[,"mse"])]
opt_spans
#> [1] 0.36
loessMod_opt <- loess(NOx ~ E, data=ethanol, span=opt_spans)
```

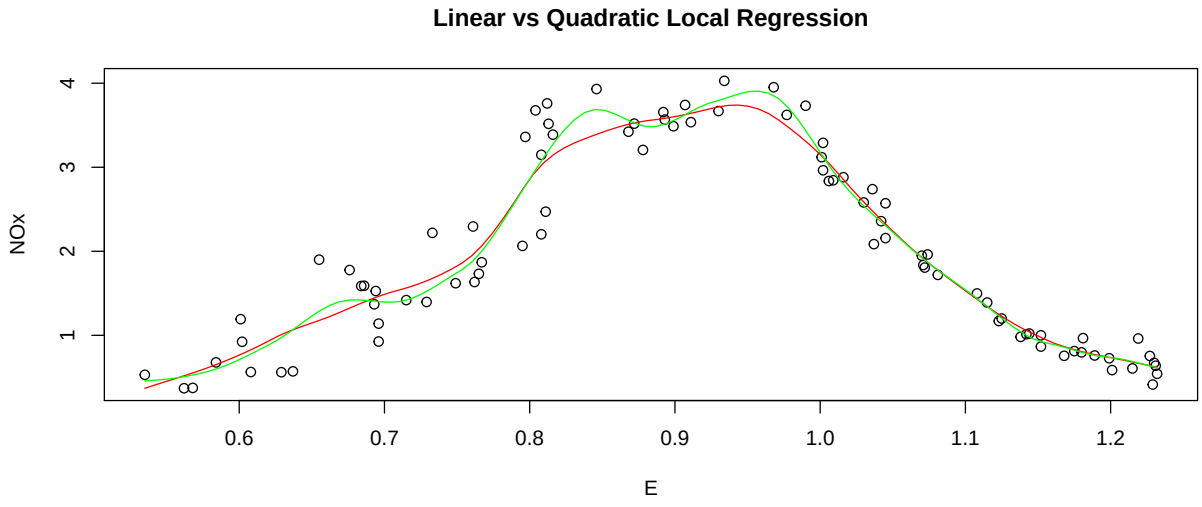
b)

```
tricube_10 <- locfit(NOx~lp(E,nn=0.1), data=ethanol)
tricube_30 <- locfit(NOx~lp(E,nn=0.3), data=ethanol)
tricube_50 <- locfit(NOx~lp(E,nn=0.5), data=ethanol)
tricube_opt <- locfit(NOx~lp(E,nn=opt_spans), data=ethanol)

plot(ethanol$NOx, x=ethanol$E, main="Local Regression: Different Smoothing Params", xlab="E", ylab="NOx
lines(tricube_10, col="red")
lines(tricube_30, col="black")
lines(tricube_50, col="blue")
lines(tricube_opt, col="green", lw=2)
```



c)

```
lin <- locfit(NOx ~ E, data=ethanol, alpha = 0.2, deg=1)
quad <- locfit(NOx ~ E, data=ethanol, alpha = 0.2, deg=2)

plot(ethanol$NOx, x=ethanol$E, main="Linear vs Quadratic Local Regression", xlab="E", ylab="NOx")
lines(lin, col="red")
lines(quad, col="green")
```

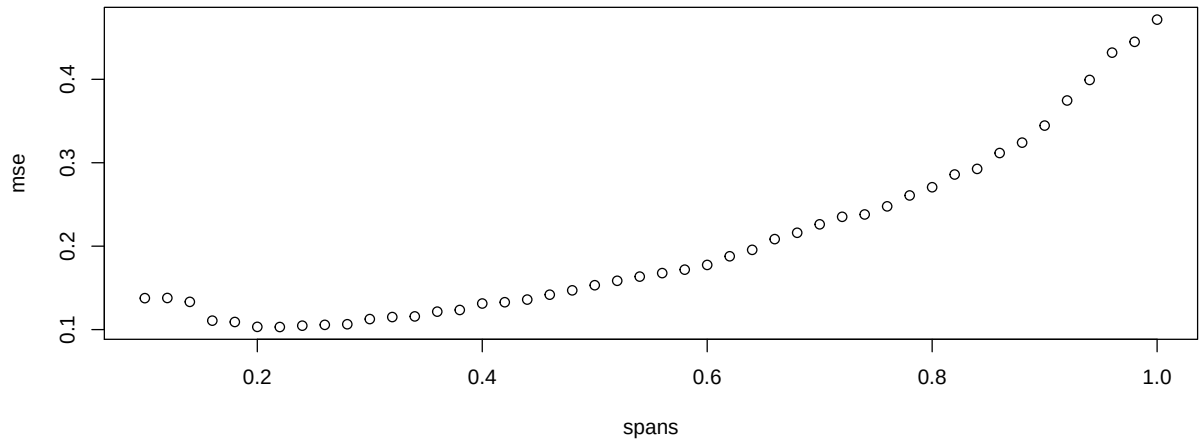



```
lin_pred <- cbind(predict(lin, newdata = c(0.65)), predict(lin, newdata = c(0.9)))
quad_pred <- cbind(predict(quad, newdata = c(0.65)), predict(quad, newdata = c(0.9)))

preds <- as.data.frame(rbind(lin_pred, quad_pred), row.names = c("lin","quad"))
colnames(preds) <- c("0.65", "9")
```

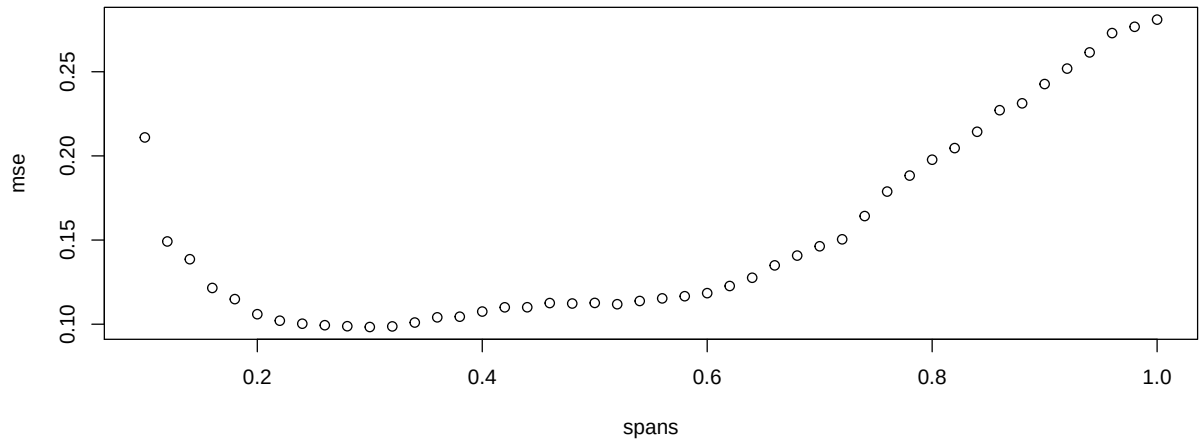
```
preds
#>          0.65        9
#> lin  1.146328 3.602708
#> quad 1.229701 3.562719
```

d)

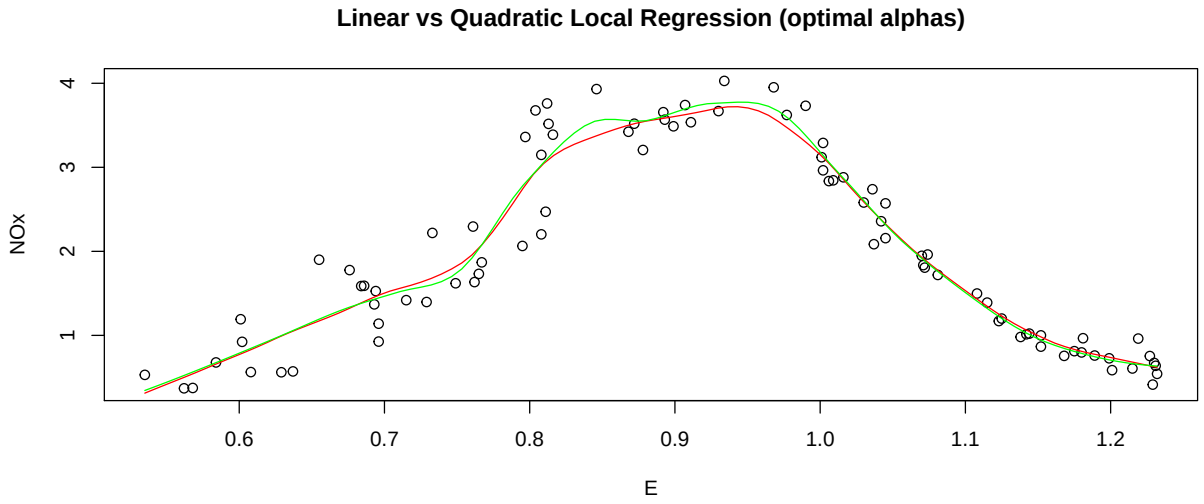
```
mse1 <- c()
for (span in spans){
  mse <- c()
  for(j in 1:5){
    #Segement your data by fold using the which() function
    testIndexes <- which(folds==j,arr.ind=TRUE)
    testData <- data[testIndexes, ]
    trainData <- data[-testIndexes, ]
    #Use the test and train data partitions however you desire...

    fit <- locfit(NOx ~ E, data=trainData, alpha = span, deg=1)

    y.pred <- predict(fit, newdata = testData$E)
    y.true = testData$NOx

    mse <- append(mse, mean((y.pred-y.true)^2))

  }
  mse1 <- append(mse1, mean(mse))
}

lin_cv <- NULL
lin_cv$spans <- spans
lin_cv$mse <- mse1
lin_cv <- as.data.frame(lin_cv)

plot(lin_cv)
```




```r
opt_lin <- lin_cv$spans[lin_cv$mse == min(lin_cv[,"mse"])]
opt_lin
#> [1] 0.22

mse1 <- c()
for (span in spans){
  mse <- c()
  for(j in 1:5){
    #Segement your data by fold using the which() function
    testIndexes <- which(folds==j,arr.ind=TRUE)
    testData <- data[testIndexes, ]
    trainData <- data[-testIndexes, ]
    #Use the test and train data partitions however you desire...

    fit <- locfit(NOx ~ E, data=trainData, alpha = span, deg=2)

    y.pred <- predict(fit, newdata = testData$E)
    y.true = testData$NOx

    mse <- append(mse, mean((y.pred-y.true)^2))

  }
  mse1 <- append(mse1, mean(mse))
}

quad_cv <- NULL
quad_cv$spans <- spans
quad_cv$mse <- mse1
quad_cv <- as.data.frame(quad_cv)

plot(quad_cv)
```




```
opt_quad <- quad_cv$spans[quad_cv$mse == min(quad_cv[,"mse"])]
opt_quad
#> [1] 0.3

lin_opt <- locfit(NOx ~ E, data=ethanol, alpha = opt_lin, deg=1)
quad_opt <- locfit(NOx ~ E, data=ethanol, alpha = opt_quad, deg=2)

plot(ethanol$NOx, x=ethanol$E, main="Linear vs Quadratic Local Regression (optimal alphas)", xlab="E", y
lines(lin_opt, col="red")
lines(quad_opt, col="green")
```



e)

- Größte Varianz: Lokal quadratisch
- Kleiner Bias: Lokal quadratisch
- Kleinste Varianz: K-Nearest Neighbor
- Größer Bias: K-Nearest Nighbor

und Lokal lineare Regression liegt dazwischen, was in Anbetracht des Bias-Variance-Tradeoff Sinn ergibt.

f)

```
sum(residuals(loessMod10)^2)
#> [1] 3.382258
sum(residuals(loessMod30)^2)
#> [1] 7.18373
sum(residuals(loessMod50)^2)
#> [1] 9.168455
sum(residuals(loessMod_opt)^2)
#> [1] 7.443603

sum(residuals(tricube_10)^2)
#> [1] 3.442665
sum(residuals(tricube_30)^2)
#> [1] 7.093455
sum(residuals(tricube_50)^2)
#> [1] 9.067521
sum(residuals(tricube_opt)^2)
#> [1] 7.976709

sum(residuals(lin_opt)^2)
#> [1] 7.481113
sum(residuals(quad_opt)^2)
#> [1] 7.093455
```

A4

Der Gauß Kernel ist definiert als

$$K_\lambda(x, x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\lambda} \exp\left(-\frac{(x - x_i)^2}{2\lambda^2}\right) \tag{11}$$

Der Kernel gewichtet jeden Datenpunkt zusätzlich zu Least Squares

- $\lambda \to \infty$: Große Bandbreite (über alle Daten). Der Gauß Kernel konvergiert gegen 0, der Abstand zwischen x_j und den x_i bekommt einen kleinen Skalar und führt deshalb dazu, dass der Wert $\hat{y}_i$ dem der linearen Regression $\hat{b_0} + \hat{b_1} x_i$ entspricht.
- $\lambda \to 0$: Geringe Bandbreite (nur der Punkt selbst). Der Gauß Kernel konvergiert gegen 0, der Abstand zwischen x_j und den x_i bekommt einen großen Skalar und führt deshalb dazu, dass der Wert $\hat{y}_i$ gegen y_j konvergiert und somit interpoliert.