

Vorlesung Wissensentdeckung Klassifikation und Regression: Lineare Modelle

Katharina Morik, Uwe Ligges

LS 8 Informatik
Computergestützte Statistik
Technische Universität Dortmund

6.5.2010

Gliederung

- Lineare Modelle zur Klassifikation und Regression
 - Klassifikation und Regression
 - Lineare Modelle
 - Geometrie linearer Modelle: Hyperebenen
- Bias-Varianz
 - Exkurs:Erwartungswert
 - Bias und Varianz bei linearen Modellen



Grundlagen

Sei $X = \{X_1, \dots, X_p\}$ eine Menge von Zufallsvariablen und $Y \neq \emptyset$ eine Menge.

Ein Beispiel (oder Beobachtung) \vec{x} ist ein konkreter p-dimensionaler Vektor über diesen Zufallsvariablen.

Eine Menge von n Beispielen $\mathbf{X} = \{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N\}$ können wir dann als $(N \times p)$ -Matrix auffassen:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & \dots & x_{1,p} \\ x_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ x_{N,1} & x_{N,2} & \dots & x_{N,p} \end{pmatrix}$$

Dabei entspricht jede Zeile \vec{x}_i der Matrix X einem Beispiel.

Klassifikation und Regression

Beim *überwachten Lernen* (darum geht es hier), ist zusätzlich zu jeder Beobachtung \vec{x} ein *Label* (*Klasse*) y gegeben, d.h. wir haben Beobachtungen $(\vec{x}, y) \in X \times Y$.

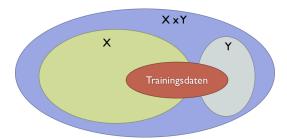
Y kann sowohl eine qualitative, als auch eine quantitative Beschreibung von \vec{x} sein.

Für den quantitativen Fall ist z.B. $Y = \mathbb{R}$ und wir versuchen für unbekanntes \vec{x} den Wert y vorherzusagen Regression.

Im Falle qualitativer Beschreibungen ist Y eine diskrete Menge und wir nutzen f zur Klassifikation.

Lernen auf Trainingsdaten

Wovon gehen wir also aus? Was ist unser Ziel?



• Wir suchen die wahre Funktion $f: X \to Y$ mit

$$f(\vec{x}) = y \quad \forall \ (\vec{x}, y) \in X \times Y$$

 Wir haben jedoch nur eine Teilmenge der Beobachtungen gegeben (Trainingsdaten)

Klassifikation und Regression

Auf Grundlage der Trainingsdaten suchen wir eine möglichst gute Annäherung \hat{f} an die wahre Funktion f.

Die Funktion \hat{f} bezeichnen wir auch als das gelernte Modell.

Haben wir ein Modell \hat{f} gelernt, so liefert uns dieses Modell mit

$$\hat{y} = \hat{f}\left(\vec{x}\right)$$

für *neue Daten* $\vec{x} \in X$ eine Vorhersage $\hat{y} \in Y$.

Klassifikation und Regression

Im Falle der Regression lässt sich so für zuvor unbekannte $\vec{x} \in X$ der Wert

$$\hat{y} = \hat{f}\left(\vec{x}\right)$$

mit $\hat{y} \in \mathbb{R}$ vorhersagen.

Dieses Modell \hat{f} lässt sich auch für die Klassifikation nutzen, bei der z.B. $\hat{y} \in \{-1, +1\}$ vorhergesagt werden sollen:

$$\hat{y} = \left\{ \begin{array}{ll} +1, & \text{falls } \hat{f}\left(\vec{x}\right) \geq \theta \\ -1, & \text{sonst} \end{array} \right.$$

Hier ist θ ein vorgegebener Schwellwert.



Beispiel

Gegeben seien Gewicht (X_1) und Größe (X_2) einiger Personen und ein Label $y \in \{m, w\}$:

	X_1	X_2	Y
x_1	91	190	m
x_2	60	170	W
x_3	41	160	W
:	:	:	:

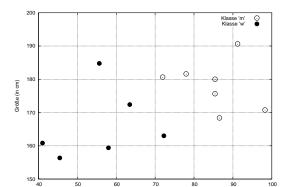
Die Tabelle enthält die zur Verfügung stehenden Trainingsdaten, also

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 91 & 190 \\ 60 & 170 \\ 41 & 160 \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

Beispiel

Es wird nun eine Funktion \hat{f} gesucht, die für neue Daten \vec{x} das Attribut Y (Geschlecht) voraussagt, also

$$\hat{y} = \left\{ \begin{array}{l} \text{m, falls } \hat{f}(x) > \theta \\ \text{w, sonst} \end{array} \right.$$



Lineare Modelle

Welche Art von Funktionen sind denkbar?

Lineare Funktionen als einfachste Funktionenklasse:

$$y = f(x) = mx + b$$
 Gerade im \mathbb{R}^2

Allerdings betrachten wir als Beispielraum den \mathbb{R}^p , d.h. wir brauchen eine verallgemeinerte Form:

$$y = f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i + \beta_0 \quad \text{mit } \beta_0 \in \mathbb{R}, \vec{x}, \vec{\beta} \in \mathbb{R}^p$$
 (1)

Die Funktion f wird also durch $\vec{\beta}$ und β_0 festgelegt und sagt uns für ein gegebenes \vec{x} das entsprechende y voraus



Bei genauerer Betrachtung von Formel (1) lässt sich $\sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i$ als Matrizenmultiplikation schreiben, also

$$y = \sum_{i=1}^{p} \beta_i x_i + \beta_0 = \vec{x}^T \vec{\beta} + \beta_0$$

Zur einfacheren Darstellung von f, wird β_0 in den Vektor $\vec{\beta}$ codiert, indem jedes Beispiel $\vec{x}=(x_1,\dots,x_p)$ aufgefasst wird als (p+1)-dimensionaler Vektor

$$(x_1,\ldots,x_p)\mapsto (1,x_1,\ldots,x_p)$$

Dies ermöglicht die Darstellung von f als:

$$y = f(\vec{x}) = \sum_{i=0}^{p} \beta_i x_i = \vec{x}^T \vec{\beta}$$

Was haben wir nun gemacht?

Wir haben (bei der Beschränkung auf lineare Modelle) nun eine Darstellung für das, was wir *lernen* wollen:

$$y = \hat{f}(\vec{x}) = \vec{x}^T \vec{\beta}$$

Wir haben die Zielfunktion \hat{f} in Abhängigkeit von $\vec{\beta}$ geschrieben und müssen *nur noch* das passende $\vec{\beta}$ finden.

Veranschaulichung

Bevor wir uns an die Wahl des passenden $\vec{\beta}$ machen, zunächst einige Vorüberlegungen.

Betrachten wir dazu die binäre Klassifikation ($Y = \{-1, +1\}$):

- Was passiert dabei eigentlich anschaulich?
- Wie klassifiziert unser \hat{f} die Daten?
- Wie wirkt sich die Wahl von $\vec{\beta}$ aus?

Zur Erinnerung: Hyperebene

Sei $V=\mathbb{R}^p$ ein Vektorraum, dann ist eine Hyperebene H ein (p-1)-dimensionaler affiner Untervektorraum.

H lässt sich über einen Stützvektor \vec{a} und einen Normalenvektor $\vec{\beta}$ schreiben als

$$H = \left\{ x \in \mathbb{R}^p \mid \vec{\beta}(\vec{x} - \vec{a}) = 0 \right\}$$

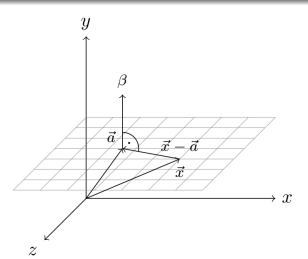
Hesse Normalform

Die Ebenengleichung

$$\vec{\beta}(\vec{x} - \vec{a}) = 0$$

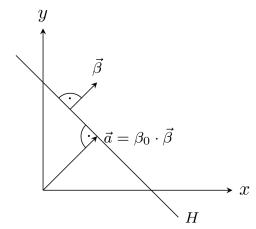
ist in *Hesse Normalform*, falls $||\vec{\beta}|| = 1$.

Beispiel



(Hyper-) Ebene im \mathbb{R}^3 mit Normalenvektor $\vec{\beta}$ und Stützvektor \vec{a} .

Beispiel - Ursprung zur Ebene



Normalisierung I

Der Vektor $\vec{\beta}$ soll die Euklidsche Länge 1 haben. Falls das noch nicht der Fall ist, normalisieren wir:

$$\vec{\beta} := \frac{\vec{\beta'}}{\parallel \vec{\beta'} \parallel}$$

$$\vec{\beta'} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$
$$\vec{\beta_0} = \begin{pmatrix} 4 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die Ebenengleichung ist nicht in Hesse Normalform, weil $\|\vec{\beta'}\| = \sqrt{3} \neq 1$.



Wir normalisieren

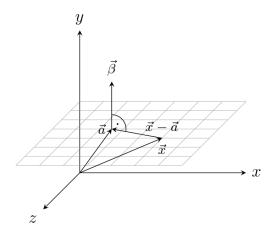
$$\vec{\beta} = \frac{\vec{\beta'}}{\parallel \vec{\beta'} \parallel} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}.$$

Jetzt ist $\beta_0 = \frac{-4}{\sqrt{3}}$ der Abstand der Ebene zum Ursprung.

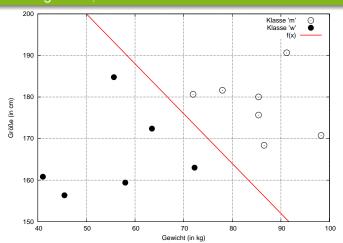
Der Normalenvektor ist hier
$$\beta^* = \frac{\beta}{\|\beta\|}$$



Normalisierung III

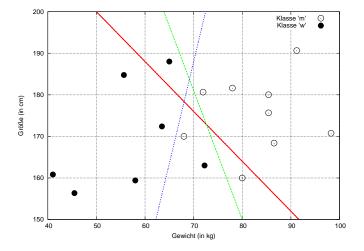


Beispiel: Ein mögliches $\vec{\beta}$



$$f(\vec{x}) = \vec{x}^T \hat{\vec{\beta}} \quad \text{mit} \ \ \hat{\vec{\beta}} = \left(\begin{array}{c} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} 260 \\ 1 \\ 1.2 \end{array} \right)$$

Es ist nicht garantiert, dass $\vec{\beta}$ immer passt!



Modell-Anpassung

Unsere linearen Modelle sind durch $\vec{\beta}$ parametrisiert, das Lernen eines Modells haben wir also auf die Wahl eines $\vec{\beta}$ abgewälzt.

Das wirft eine Reihe von Fragen auf:

- Was ist ein gutes $\vec{\beta}$?
- Gibt es ein optimales $\vec{\beta}$?
- Welche Möglichkeiten haben wir, unser Modell zu beurteilen?

Eine Möglichkeit: Berechne den Trainingsfehler

$$Err(\vec{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} |y_i - \hat{f}(\vec{x}_i)| = \sum_{i=1}^{N} |y_i - x_i^T \vec{\beta}|$$



Häufig wird als Fehlerfunktion die *quadratische Fehlersumme* (RSS) verwendet:

$$RSS(\vec{\beta}) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - \vec{x_i}^T \vec{\beta})^2$$
$$= (\vec{y} - \mathbf{X}\vec{\beta})^T (\vec{y} - \mathbf{X}\vec{\beta})$$

Wir wählen jetzt $\vec{\beta}$ derart, dass der Fehler minimiert wird:

$$\min_{\vec{\beta} \in \mathbb{R}^p} RSS(\vec{\beta})$$

⇒ Konvexes Minimierungsproblem!



Um $RSS(\vec{\beta})$ zu minimieren, bilden wir die partielle Ableitung nach $\vec{\beta}$:

$$\frac{\partial RSS(\vec{\beta})}{\partial \beta} = \mathbf{X}^T (\mathbf{y} - \mathbf{X}\vec{\beta})$$

Notwendige Bedingung für die Existenz eines (lokalen) Minimums von RSS ist

$$\frac{\partial RSS(\vec{\beta})}{\partial \beta} = \mathbf{X}^{T}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\vec{\beta}) = 0$$

Ist $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ invertierbar, so erhalten wir

$$\hat{\vec{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$



Mit Hilfe der Minimierung der (quadratischen) Fehlerfunktion RSS auf unseren Trainingsdaten haben wir ein (bzgl. RSS) optimales $\hat{\vec{\beta}}$ gefunden.

Damit liefert unser Modell Voraussagen \hat{y} für $\vec{x} \in X$:

$$\hat{y} = \hat{f}(\vec{x}) = x^T \hat{\vec{\beta}}$$

Sind wir schon fertig?

- Schön wär's!
- Aber drei Gründe sprechen für weitere Arbeit:
 - Es ist nicht immer so einfach, z.B. dann nicht, wenn wir viele Dimensionen haben (Fluch der hohen Dimension).
 - 2 Vielleicht lassen sich die Beispiele nicht linear trennen!
 - Nur den Fehler zu minimieren reicht nicht aus, wir suchen noch nach weiteren Beschränkungen, die zu besseren Lösungen führen.
- Also schauen wir uns den Fehler noch einmal genauer an, stoßen auf Bias und Varianz und merken, dass wir noch keine perfekte Lösung haben.

Fehler

- Bisher haben wir mit RSS die Fehler einfach summiert.
- Wir wollen aber einbeziehen, wie wahrscheinlich der Fehler ist – vielleicht ist er ja ganz unwahrscheinlich!
- Wann können wir denn einen Fehler erwarten?

Zur Erinnerung: Erwartungswert

Erwartungswert

Sei X eine diskrete Zufallsvariable, mit Werten x_1, \ldots, x_n und p_i die Wahrscheinlichkeit für x_i . Der Erwartungswert von X ist

$$E(X) = \sum_{i} x_i p_i = \sum_{i} x_i P(X = x_i)$$

Ist X eine stetige Zufallsvariable und f die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, so ist der Erwartungswert von X

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



Eigenschaften

Seien X, Y und X_1, \dots, X_n Zufallsvariablen, dann gilt:

Der Erwartungswert ist additiv, d.h. es gilt

$$E\left(\sum_{i=1}^{n} X_i\right) = \sum_{i=1}^{n} E(X_i) \tag{2}$$

• Ist Y = kX + d, so gilt für den Erwartungswert

$$E(Y) = E(kX + d) = kE(X) + d$$

• Sind die Zufallsvariablen X_i stochastisch unabhängig, gilt

$$E\left(\prod_{i=1}^{n} X_i\right) = \prod_{i=1}^{n} E(X_i)$$



Varianz und Standardabweichung

Über den Erwartungswert einer Zufallsvariablen X sind mehrere Eigenschaften von X definiert, die helfen, X zu charakterisieren:

Varianz

Sei X eine Zufallsvariable mit $\mu=E(X)$. Die Varianz Var(X) ist definiert als

$$Var(X) := E\left((X - \mu)^2\right).$$

Standardabweichung

Die Standardabweichung σ einer Zufallsvariable X ist definiert als

$$\sigma := \sqrt{Var(X)}$$

Die Varianz wird häufig auch mit σ^2 bezeichnet.

Varianz und Standardabweichung

Verschiebungssatz

Sei X eine Zufallsvariable, für die Varianz gilt

$$Var(X) = E(X - E(X))^2 = E(X^2) - (E(X))^2$$
 (3)

Eine weitere Charakteristik, die häufig zur Beschreibung von erwarteten Fehlern verwendet wird, ist die Verzerrung:

Verzerrung (Bias)

Sei X eine Zufallsvariable, dann ist die Verzerrung definiert als der erwartete Schätzfehler für X

$$Bias(\hat{x}) = E(X - \hat{x}) \tag{4}$$



Erwartungswert: Sei X eine diskrete Zufallsvariable, mit Werten x_1, \ldots, x_n und p_i die Wahrscheinlichkeit für x_i . Der Erwartungswert von X ist

$$E(X) = \sum_{i} x_i p_i = \sum_{i} x_i P(X = x_i)$$

Ist X eine stetige Zufallsvariable und f die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion, so ist der Erwartungswert von X

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

Satz: Ist die Dichtefunktion f einer Zufallsvariablen symmetrisch um einen Wert c, also

$$f(c-x) = f(c+x) \ \forall x$$

dann ist E(X) = c.

Erwartungswert des Fehlers einer Regression

Erwarteter quadratischer Fehler: Gelernte Funktion $\hat{f}: X \to Y$, der Erwartungswert ihres Fehlers ist:

$$EPE(f) = E(Y - \hat{f}(X))^2 \tag{5}$$

Optimierungsproblem: Wähle \hat{f} so, dass der erwartete Fehler minimiert wird!

$$\hat{f}(x) = argmin_c E_{Y|X}((Y-c)^2 | X = x)$$

Lösung (Regressionsfunktion): f(x) = E(Y|X=x)

Bias und Varianz

Zwei Aspekte machen den erwarteten Fehler aus, die Verzerrung (Bias) und die Varianz. Wir wollen den Fehler an einem Testpunkt $x_0=0$ angeben und mitteln über allen Trainingsmengen \mathcal{T} .

$$MSE(\vec{x_0}) = E_{\mathcal{T}}[y_0 - \hat{y_0}]^2$$

$$= E_{\mathcal{T}}[\hat{y_0} - E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0})]^2 + [E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0} - y_0)]^2$$

$$= E_{\mathcal{T}}[y_0^2] - E_{\mathcal{T}}[2y_0\hat{y_0}] + E_{\mathcal{T}}[\hat{y_0}^2]$$

$$= Var_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}) + Bias^2(\hat{y_0})$$

Wie das?



Herleitung der Varianz in MSE

Nach dem Verschiebungssatz (3) gilt

$$Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0}) = E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}^{2}] - (E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}])^{2}$$

$$\Leftrightarrow E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}^{2}] = Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0}) + (E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}])^{2}$$
(6)

Damit folgt

$$MSE(\vec{x}_{0}) = E_{\mathcal{T}}[y_{0} - \hat{y}_{0}]^{2} = E_{\mathcal{T}} \left[y_{0}^{2} - 2y_{0}\hat{y}_{0} + \hat{y}_{0}^{2} \right]$$

$$\stackrel{(2)}{=} E_{\mathcal{T}}[y_{0}^{2}] - E_{\mathcal{T}}[2y_{0}\hat{y}_{0}] + E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}^{2}]$$

$$\stackrel{(6)}{=} E_{\mathcal{T}}[y_{0}^{2}] - E_{\mathcal{T}}[2y_{0}\hat{y}_{0}] + Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0}) + (E_{\mathcal{T}}[\hat{y}_{0}])^{2}$$

$$= E_{\mathcal{T}}[y_{0}^{2} - 2y\hat{y}_{0} + \hat{y}_{0}^{2}] + Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0})$$

$$= E_{\mathcal{T}}[y_{0} - \hat{y}_{0}]^{2} + Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0})$$

$$\stackrel{(4)}{=} Bias^{2}(\hat{y}_{0}) + Var_{\mathcal{T}}(\hat{y}_{0})$$

Herleitung des Bias in MSE

Somit gilt

$$MSE(\vec{x_0}) = Var_T(\hat{y_0}) + Bias^2(\hat{y_0})$$

Die Dekomposition des MSE in Bias und Varianz abstrahiert so, dass wir besser über Modelle nachdenken können.

Frage: Wie wirken sich Bias und Varianz nun auf unsere linearen Modelle aus?



Erwartungswert des Fehlers bei linearen Modellen

Unter der Annahme, dass unsere Beispiele Messfehler enhalten, aber X und Y wirklich linear voneinander abhängen (Bias=0), passen wir das Modell $Y = X^T \beta + \epsilon$ durch Minimieren des quadratischen Fehlers an.

Der erwartete Fehler der \hat{y} -Vorhersage für ein beliebiges $\vec{x_0}$ ist:

$$EPE(\vec{x_0}) = E_{y_0|\vec{x_0}} E_{\mathcal{T}}(y_0 - \hat{y_0})^2$$

$$= Var(y_0|\vec{x_0}) + E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0} - E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}))^2 + (E_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}) - E_{\mathcal{T}}(y_0))^2$$

$$= Var(y_0|\vec{x_0}) + Var_{\mathcal{T}}(\hat{y_0}) + Bias^2(\hat{y_0})$$

$$= \sigma^2 + E_{\mathcal{T}}(\vec{x_0}^T(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\vec{x_0}\sigma^2) + 0^2$$

Die zusätzliche Varianz kommt durch das Rauschen.

Zusammenhang zwischen Anzahl der Beispiele, der Attribute und erwartetem Fehler

Beziehen wir den Erwartungswert von \vec{x} ein, erhalten wir

$$E_{\vec{x}}EPE(\vec{x}) = \sigma^2(p/N) + \sigma^2$$

Bei kleinem σ^2 und großem N klappt alles auch bei großem p, wenn das lineare Modell perfekt passt, d.h. die Beispiele sind linear trennbar.



ineare Modelle zur Klassifikation und Regression Bias-Variar

Fluch der hohen Dimension bei linearen Modellen

- Leider mussten wir annehmen, dass das Modell genau passt, um den erwarteten Fehler klein zu halten.
- Wir wissen aber nicht, welche Art von Funktion gut zu unseren Daten passt! Modellselektion ist schwierig!
- Das Modell muss immer komplizierter werden, je mehr Dimensionen es gibt.
- Bei linearen Modellen entspricht die Komplexität des Modells direkt p, denn β hat so viele Komponenten wie p bzw. p+1.

Lineare Modelle zur Klassifikation und Regression Bias-V

Bias und Varianz bei linearen Modellen

Das lineare Modell wird an die Daten angepasst durch

$$\hat{f}_p(\vec{x}) = \hat{\beta}^T \vec{x}$$

Der Fehler ist dann für ein beliebiges \vec{x} :

$$Err(\vec{x}) = E[(Y - \hat{f}_p(\vec{x}))^2 | X = \vec{x}]$$
 (7)

$$= \sigma_{\epsilon}^2 + Var(\hat{f}_p(\vec{x}) + \left[f(\vec{x}) - E\hat{f}_p(\vec{x})\right]^2$$
 (8)

Im Mittel über allen $\vec{x_i}$ ist $Var(\hat{f_p}) = (p/N)\sigma^2$. Modellkomplexität und Varianz hängen bei linearen Modellen direkt zusammen. Der Trainingsfehler linearer Modelle ist:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} Err(x_i) = \sigma_{\epsilon}^2 + \frac{p}{N} \sigma_{\epsilon}^2 \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left[f(\vec{x_i}) - E\hat{f}(\vec{x_i}) \right]^2 \tag{9}$$

Lineare Modelle

Die grünen und roten Datenpunkte werden durch eine Ebene getrennt.

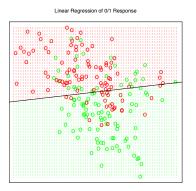


Figure 2.1: A classification example in two dimensions. The classes are coded as a binary variable—

GREEN = 0, RED = 1—and then fit by linear regression. The line is the decision boundary defined by $x^T \hat{\beta} = 0.5$.

Was wissen Sie jetzt?

- Sie haben theoretisch lineare Modelle für Klassifikation und Regression kennengelernt.
- Sie kennen das Optimierungsproblem der kleinsten Quadrate RSS für lineare Modelle (Gleichung 10).
- Sie kennen den erwarteten Fehler EPE bei linearen Modellen.
- Sie kennen den Fluch der hohen Dimension bei linearen Modellen: Komplexität und Varianz hängen an der Dimension! Der Bias kann sehr hoch sein, wenn die Beispiele tatsächlich nicht linear separierbar sind.

Bis zum nächsten Mal...

- Gehen Sie alle Folien noch einmal in Ruhe durch.
- Vertiefen Sie sich noch einmal in die Ebenengleichung! Die lineare Algebra wird immer wieder vorkommen. Sie können auch die partiellen Ableitungen für RSS mit der Normalengleichung vornehmen.
- Rechnen Sie mal ein Beispiel durch!
- Diskutieren Sie, warum Bias und Varianz so wichtig sind!
- Probieren Sie lineare Regression in RapidMiner aus!