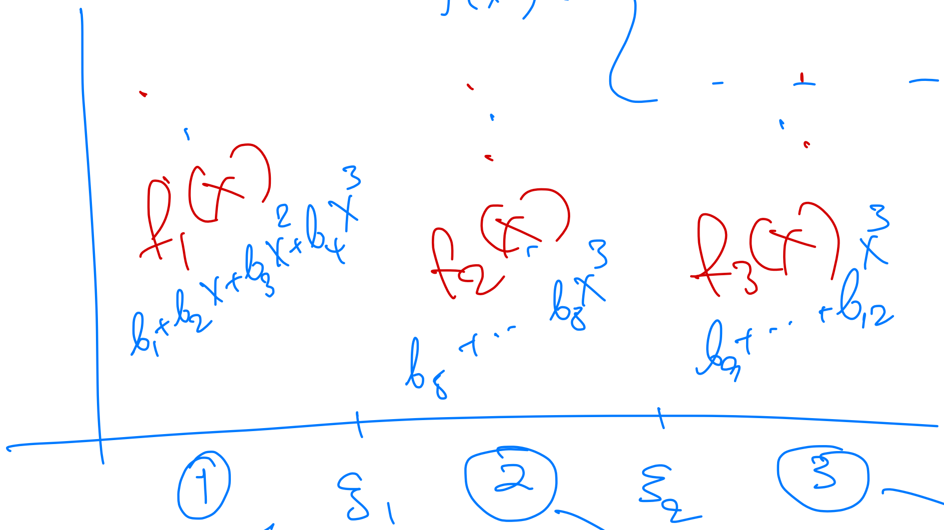
2021-11-03

$$f(x) = \begin{cases} b_1 + \cdots + b_4 x^3, & x \le \xi_1 \\ \vdots & \vdots \\ \cdots + \cdots & \end{cases}$$



$1(x < \xi_1)$ — D_1

$1(\xi_1 \le x < \xi_2)$ — D_2

$1(x \ge \xi_2)$ — D_3

$1, x, x^2, x^3$

D_1, D_2, D_3

XD_1, XD_2, XD_3

X^2D_1, X^2D_2, X^2D_3

X^3D_1, X^3D_2, X^3D_3

$\rightarrow \theta_1 D_1 + \theta_2 D_2 + \theta_3 D_3 + \theta_4 X + \theta_5 X^2 + \theta_6 X^3$

$\rightarrow + \theta_4 XD_1 + \theta_5 XD_2 + \theta_6 XD_3$

$\rightarrow h_1(x), \ldots, h_{12}(x)$ $\quad \tilde{X}$

$$f(x) = \sum_{j=1}^{12} \theta_j h_j(x)$$

X	Y	$h_1(x), \ldots$	$h_{12}(x)$
		⋮	⋮

Περιορισμοί : { Συνέχεια 0,1,2 παραγώγων στα ξ_1, ξ_2

(A) 3 πολυώνυμα

ξ_1 :
$f_1(\xi_1) = f_2(\xi_1)$
$f_1'(\xi_1) = f_2'(\xi_1)$
$f_1''(\xi_1) = f_2''(\xi_1)$

ξ_2 :
$f_2(\xi_2) = f_3(\xi_2)$
$f_2'(\xi_2) = f_3'(\xi_2)$
$f_3''(\xi_2) = f_3''(\xi_2)$

$b_1 + b_2\xi_1 + b_3\xi_1^2 + b_4\xi_1^3 = b_5 + b_6\xi_1 + b_7\xi_1^2 + b_8\xi_1^3$

3 εξ ξ_1, 3 εξ. ξ_2

Από τα $b_1, \ldots, b_{12}$ $\Rightarrow$ 6 εξισώσεις γραμμικές.

6 βαθμοί ελευθερίας ως προς b

Συναρτήσεις Βάσης

$$1,\ x,\ x^2,\ x^3,\ (x-\xi_1)_+^3\ \ (x-\xi_2)_+^3$$

$$h_1\quad h_2\quad h_3\quad h_4\quad h_5\quad h_6$$

$h_5(\xi_1)=0 \qquad h_6(\xi_2)=$

$h_5'(\xi_1^+)=0 \qquad h_6'(\xi_2)=$

$h_5''(\xi_1^+)=0 \qquad h_6''(\xi_2)=0.$

$$x>\xi_1 \qquad h_5(x)=(x-\xi_1)^3 = x^3 - 3\xi_1 x^2 + 3\xi_1^2 x - \xi_1^3$$

$$f(x)=\sum_{j=1}^{6}\theta_j h_j(x)$$

Γενικό Μοντέλο Splines τάξης M με K κόμβους $(\xi_1, \dots, \xi_K)$

τμηματικά πολυωνυμική συνάρτηση βαθμού $M-1$ με συνεχείς παραγώγους έως βαθμού $M-2$

- $M=1$: τμημ. σταθερές

- $M=2$: τμημ. γραμμ.
- $M=4$: " κυβικές

Βάση

$h_1 = 1,\ h_2 = X,\ \dots,\ h_M = X^{M-1}$

$h_{M+1} = (X-\xi_1)_+^{M-1},\ \dots,\ h_{M+K} = (X-\xi_K)_+^{M-1}$

$M+K$ συναρτήσεις βάσης

(Άσκηση: επαληθεύστε τη διάσταση K με την προσέγγιση $K+1$ διαφ. πολυωνύμων βαθμού $M-1$ με τους περιορισμούς συνέχειας)

R : library(splines)

bs : υπολογίζει τον πίνακα τιμών των $h_j(x)$ σε ένα σημείο

Φυσικά splines (Natural Cubic Splines)

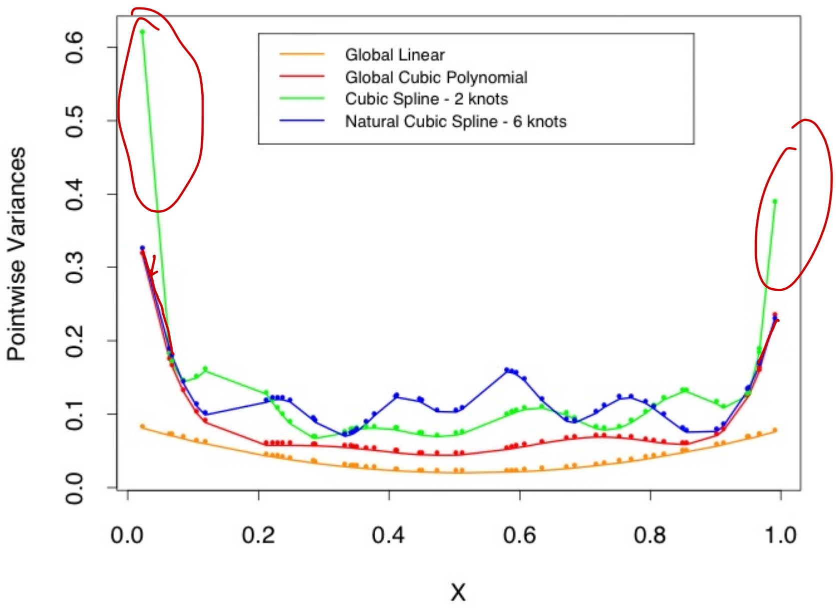


FIGURE 5.3. *Pointwise variance curves for four different models, with X consisting of 50 points drawn at random from $U[0,1]$, and an assumed error model with constant variance. The linear and cubic polynomial fits have two and four degrees of freedom, respectively, while the cubic spline and natural cubic spline each have six degrees of freedom. The cubic spline has two knots at 0.33 and 0.66, while the natural spline has boundary knots at 0.1 and 0.9, and four interior knots uniformly spaced between them.*

Περιορισμοί

Τα τμήματα 1 κ' k+1 έχουν γραμμικούς όρους | Natural Spline

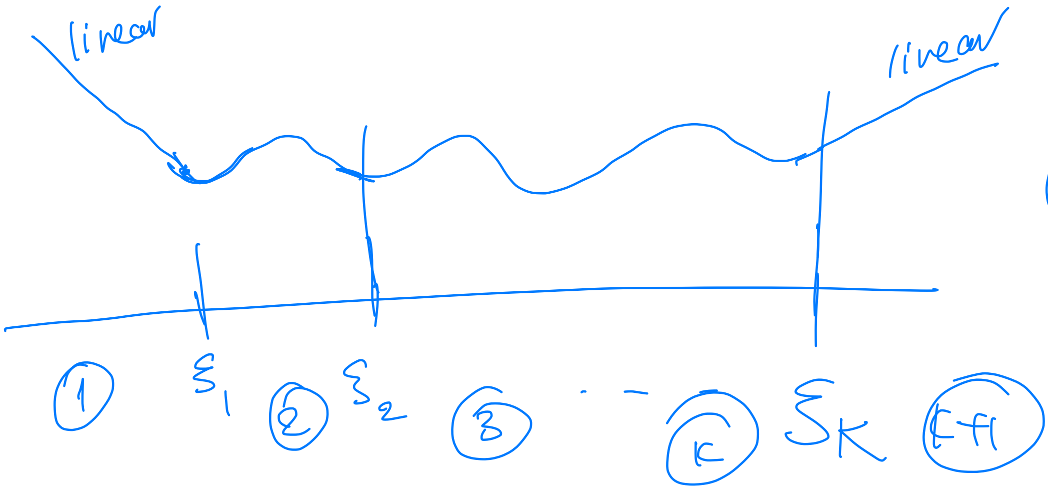
Ποια είναι η κατάλληλη βάση ?

$k = 1, \dots, K$

$$N_1 = 1, \quad N_2 = X$$

$$N_{2+k} = d_k(X) - d_{K-1}(X),$$

$$d_k(X) = \frac{(X-\xi_k)^3_+ - (X-\xi_K)^3_+}{\xi_K - \xi_k}$$



$(M=4)$

Αν πάρουμε την αρχική βάση $h_1, \dots, h_{K+4}$

$$f(x) = b_1 + b_2 X + b_3 X^2 + b_4 X^3 + \sum_{k=1}^{K} \theta_k (X-\xi_k)^3_+$$

$b_3 = 0$, $b_4 = 0$ | Επιπλέον για το τμήμα $K+1$ $(X \geq \xi_K)$

$$f(x) = b_1 + b_2 X + \sum_{k=1}^{K} \theta_k (X-\xi_k)^3$$

→ ανάπτυγμα

Περιορισμοί

$$\sum_{k=1}^{K} \theta_k = \sum_{k=1}^{K} \theta_k \xi_k = 0$$

$\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{K-2} \Rightarrow$ $\theta_{K-1} =$

$\theta_K =$

$$f(x) = b_1 + b_2 X + \sum_{k=1}^{K-2} \theta_k (X - \xi_k)^3_+ + \theta_{K-1} (X - \xi_{K-1})^3_+$$

$$+ \theta_K (X - \xi_K)^3_+$$

Smoothing Splines (Regularization)

Μοντέλο πρόβλεψης $f(x)$.

(μη παραμετρικό)

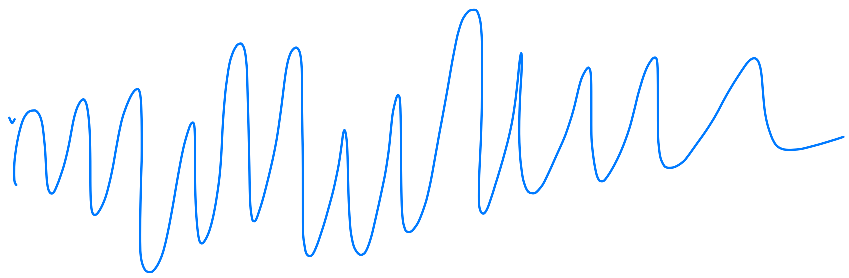
Απαίτηση: $f(x)$ συνεχείς παραγ. 0, 1, 2.

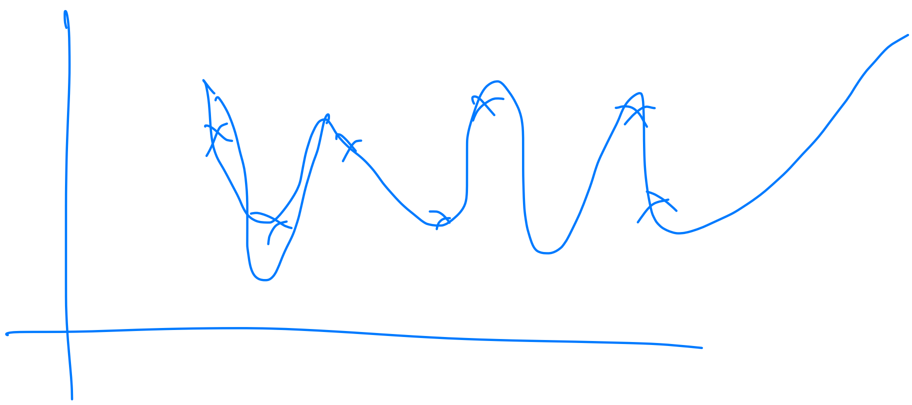
Training sample: (x_1, y_1)

$\vdots$

(x_N, y_N)

$$RSS = \sum_{i=1}^{N} \left(y_i - f(x_i)\right)^2 \leftarrow \min_f$$





Regularization

$$\min_{f} RSS(f) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int [f''(t)]^2 dt.$$

$\lambda = 0 \Rightarrow$ interpolation στο training set.

$\lambda \to \infty \Rightarrow$ η f περιορίζεται σε $b_0 + b_1 X \Rightarrow$ linear regression

Μια βέλτιστη λύση f^* που είναι natural cubic spline με κόμβους όλα τα $x_i, i=1,\dots,N$ $\forall \lambda$.