2021-11-1

Επεκτάσεις σε Μη Γραμμικές Συναρτήσεις (Splines).

$$Y = x^T b$$

Σύνορα $\quad x^T b = h$

$$Y = b_0 + b_1 X + b_2 X^2$$

$$= b_0 + b_1 X_1 + b_2 X_2 \qquad X_1 = X,\quad X_2 = X^2$$

Ιδέα Δημιουργούμε νέες μεταβλητές από μη γραμμικούς μετασχηματισμούς των αρχικών μεταβλητών $X = (X_1, \dots, X_p) \in \mathbb{R}^p$

M μετασχηματισμοί: $h_1(X), h_2(X), \dots, h_M(X)$

$$f(x) = \sum_{m=1}^{M} b_m h_m(x) \quad \leftarrow \text{linear basis expansion}$$

$(h_1(x), \dots, h_M(x))$ συναρτήσεις βάσης

Παραδ.

(1) $h_m(X) = X_m, \quad m = 1, \dots, p.$

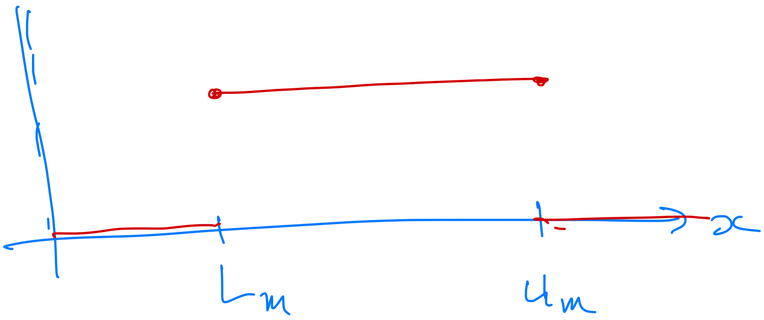
(2) $h_m(x) = X_j^2$ και $X_j X_k$ ή γενικά $X_j^{l_1} X_k^{l_2}$

Όροι για πολυώνυμο d-βαθμού $= O(p^d)$

③ $h_m(X) = \log(x_j)$ ή $\sqrt{x_j}$ ...

④ $h_m(X) = \|X\|_2 = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_p^2}$

⑤ $h_m(X) = 1(L_m \le X_m \le U_m) = \begin{cases} 1, & X_m \in [L_m, U_m] \\ 0, & \text{αλλού} \end{cases}$



Χρήσιμες για δημιουργία τμηματικά πολυωνυμικών συναρτήσεων.

$\mathcal{D}$: "λεξικό" (σύνολο δυνατών μετασχηματισμών)

Έλεγχος πολυπλοκότητας του μοντέλου αν $|\mathcal{D}|$ πολύ μεγάλο.

ⓐ Περιορισμός σε ένα υποσύνολο του $\mathcal{D}$

π.χ. προσθετικές συναρτήσεις

$$f(X) = \sum_{j=1}^{p} f_j(X_j)$$

(αποκλείονται π.χ. $X_1 X_2$, ...)

$$f_j(X_j) = \sum_{m=1}^{M_j} \beta_{jm} h_{jm}(X_j)$$

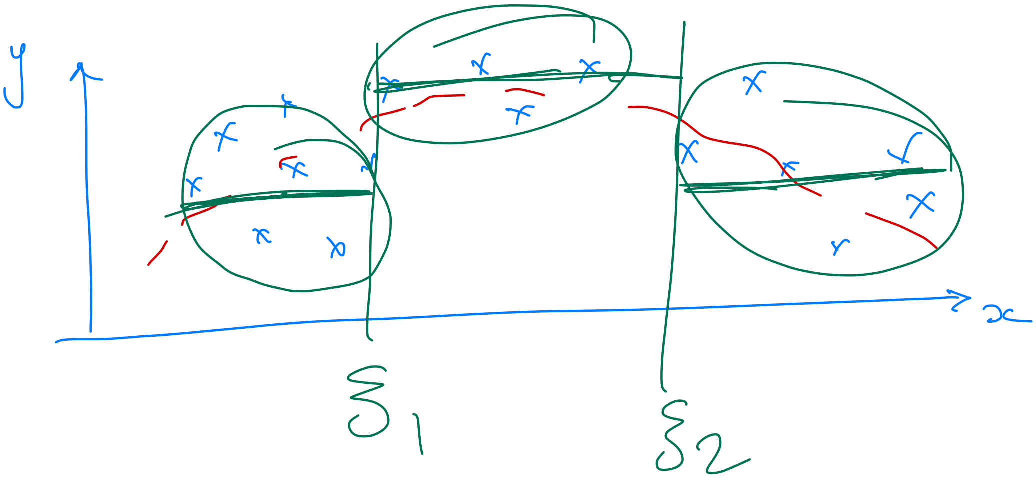
β) Μέθοδος επιλογής μεταβλητών (π.χ. stepwise regression)

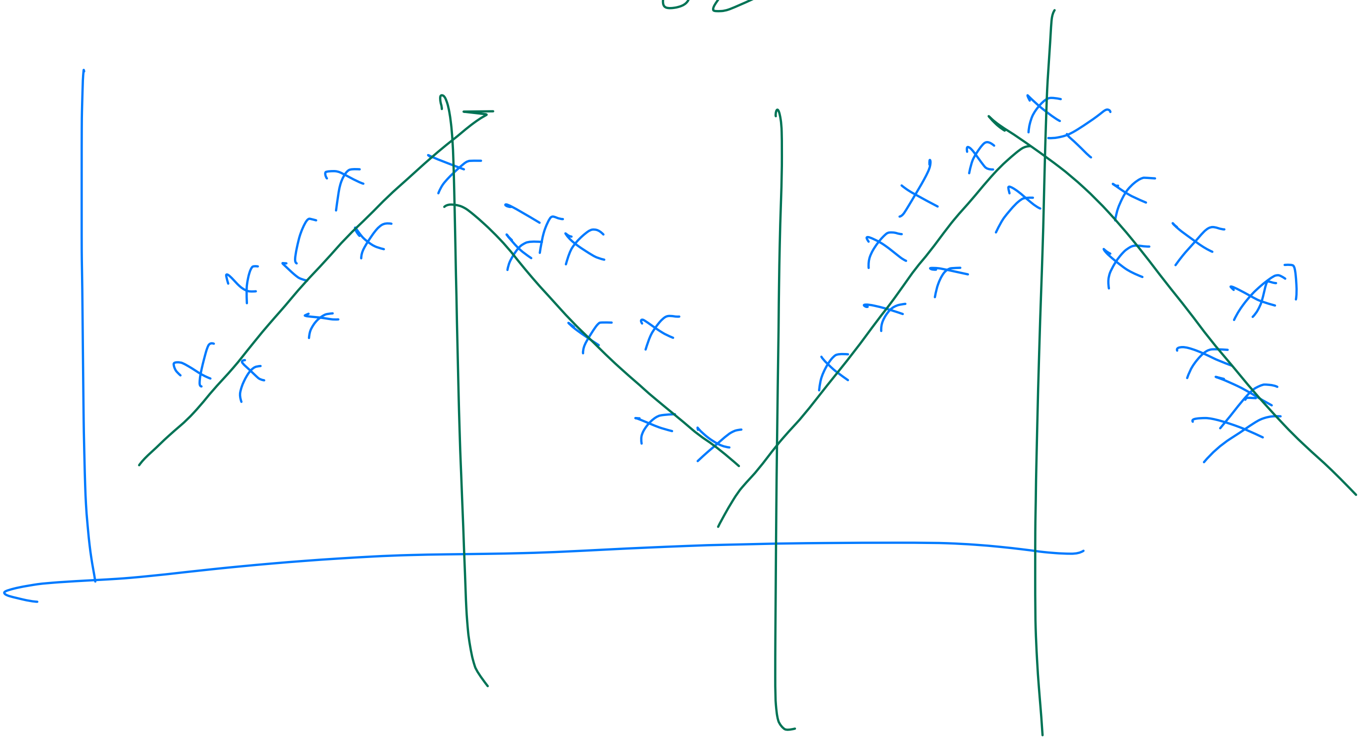
γ) Regularization (π.χ. ridge)

Τμηματικά Πολυωνυμικές Συναρτήσεις (Splines).

Ιδέα: Διαιρούμε το πεδίο ορισμού της X σε συνεχόμενα διαστήματα, κ' μοντελοποιούμε την $f(x)$ με διαφορετικά πολυώνυμα σε κάθε διάστημα.

Αρχικά για $p=1$


y
x
ξ_1
ξ_2

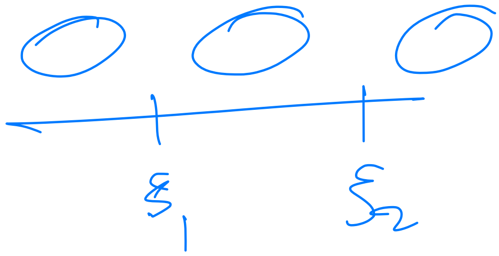


Έστω τρία διαστήματα

$$X < \xi_1$$

$$\xi_1 \le X < \xi_2$$

$$X \ge \xi_2$$



---

(1) PW-constant:

$$h_1(X) = 1(X < \xi_1)$$

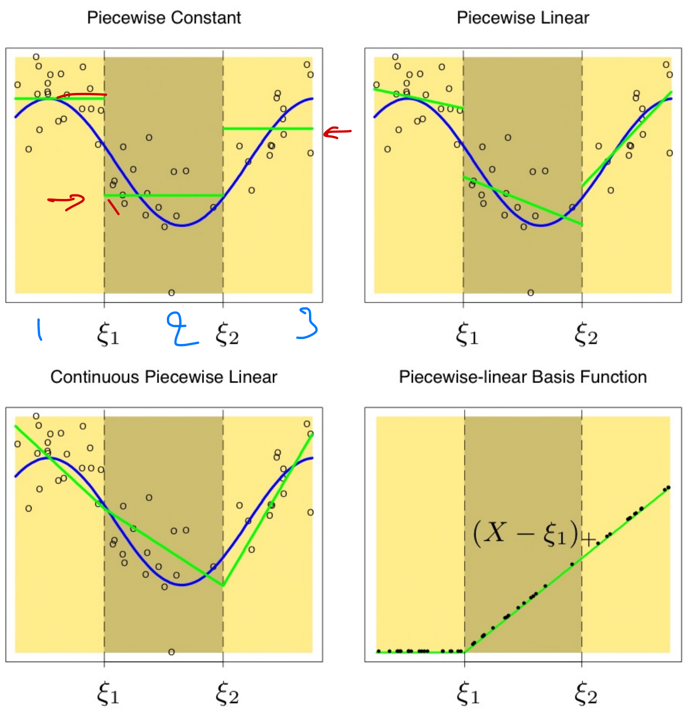
$$h_2(X) = 1(\xi_1 \le X_1 < \xi_2)$$

$$h_3(X) = 1(X \ge \xi_2)$$

$$\boxed{f(X) = b_1 h_1(X) + b_2 h_2(X) + b_3 h_3(X)}$$

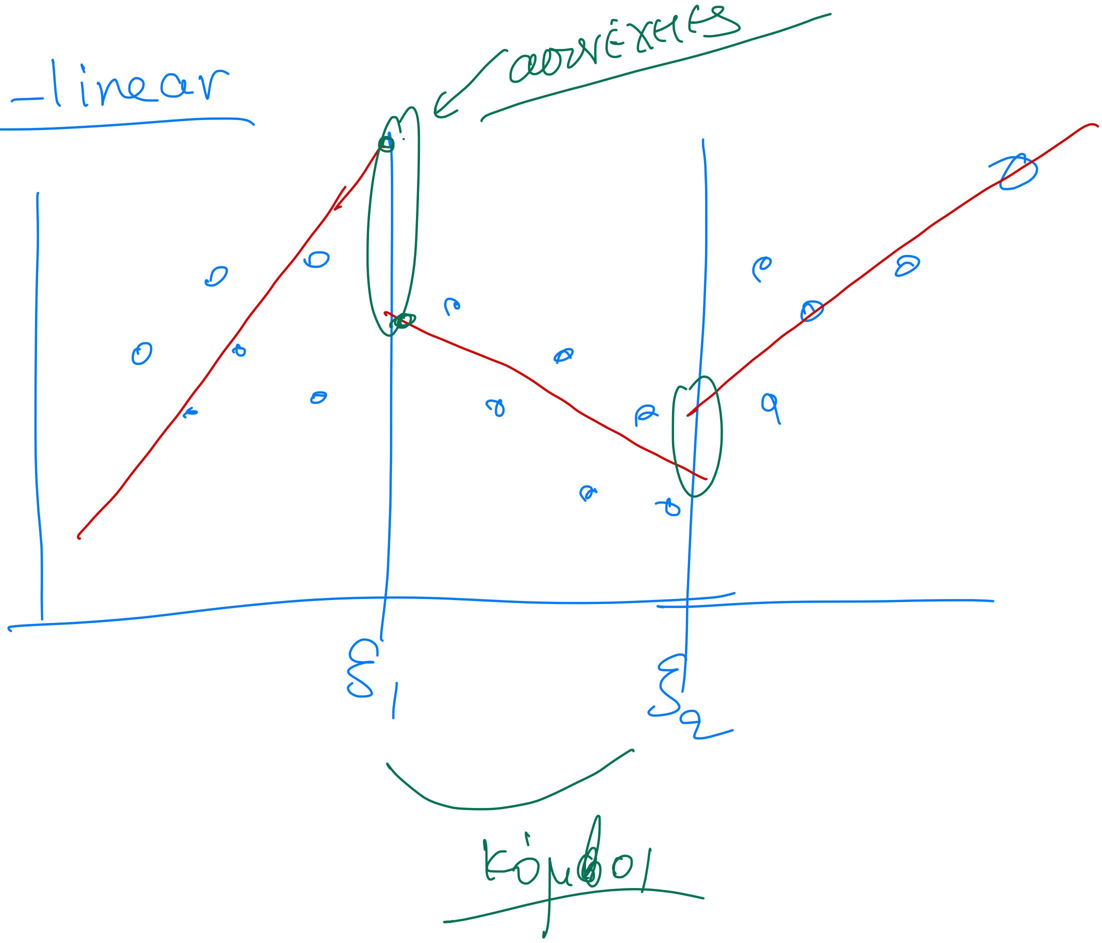
μπορούν να παραστήσουν οποιαδήποτε συνάρτηση της μορφής

$$\alpha_1 h_1(x) + \alpha_2 h_2(x) + \alpha_3 h_3(x) = f(x) = \begin{cases} \alpha_1, & x < \xi_1 \\ \alpha_2, & \xi_1 \le X < \xi_2 \\ \alpha_3, & X \ge \xi_2 \end{cases}$$



$\hat{b}_k = \bar{Y}_k$ (για το διάστημα k) , $k = 1, 2, 3$.

② PW_linear

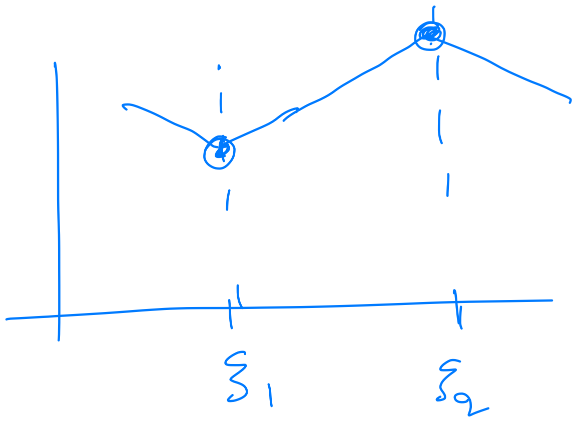


Γενική αναπαράσταση

$$f(x) = \begin{cases} b_{10} + b_{11}x, & x < \xi_1 \\ b_{20} + b_{21}x & \xi_1 \le x < \xi_2 \\ b_{30} + b_{31}x, & x \ge \xi_2 \end{cases}$$

6 παράμετροι

$(b_{10}, \dots, b_{31})$



Συνέχεια

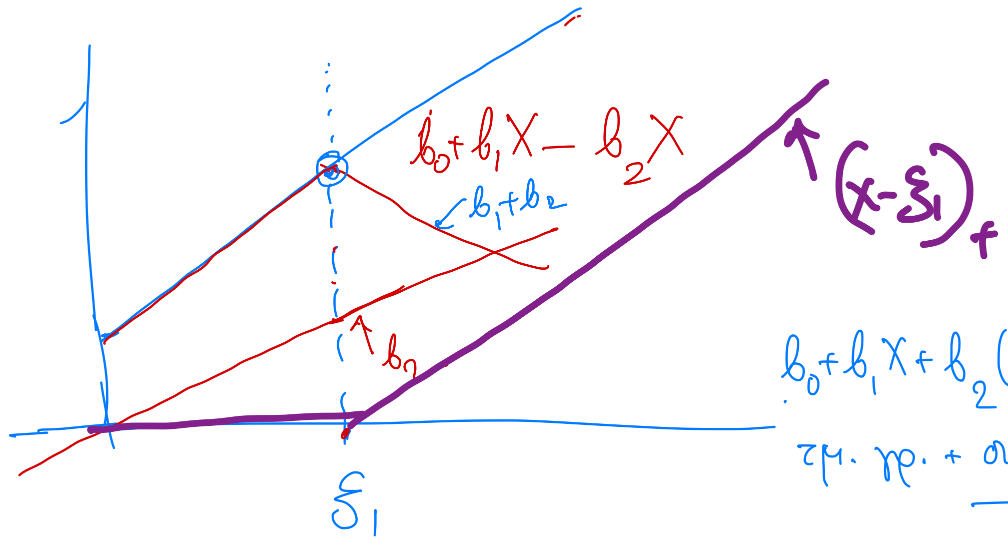
→ στο ξ_1: $f(\xi_1^-) = f(\xi_1^+) \Rightarrow b_{10} + b_{11}\xi_1 = b_{20} + b_{21}\xi_1$ (1)

→ ξ_2: $b_{20} + b_{21}\xi_2 = b_{30} + b_{31}\xi_2$ (2)

$\{ (b_{10}, \dots, b_{31}) \in \mathbb{R}^6 : (1) \text{ και } (2) \}$ διάσταση $= 4$

? $\exists$ 4 συναρτήσεις $h_1(x), \dots, h_4(x)$:

Τμ. γραμμ. συνεχής $\Leftarrow$ $f(x) = \sum_{m=1}^{4} \gamma_m h_m(x)$?



$b_0+b_1X+b_2(X-\xi_1)_+$

τμ. γρ. + συνεχής στο ξ_1

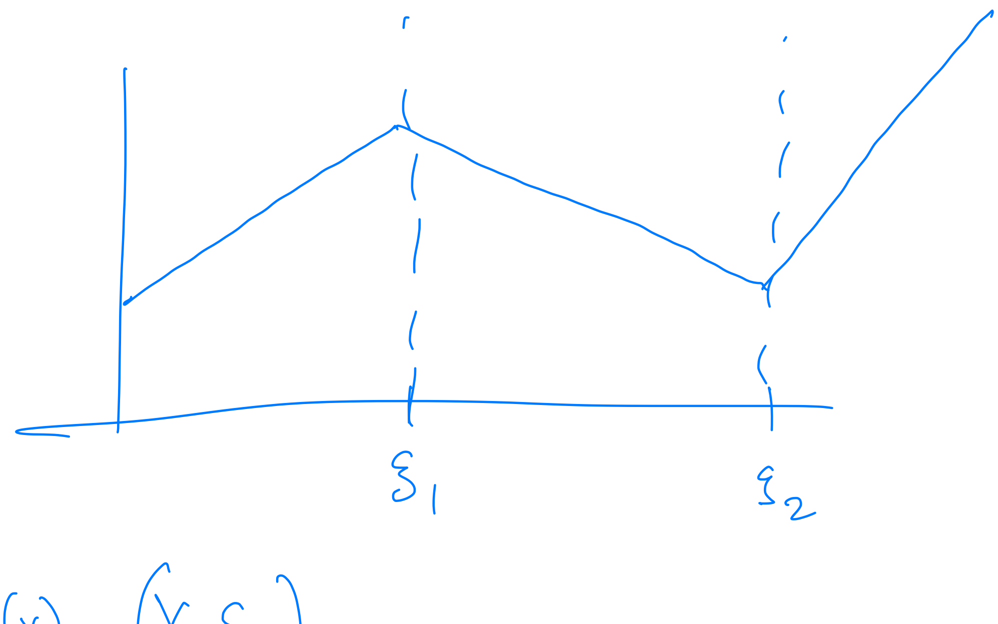
$$\left.\begin{aligned} h_1(X) &= 1 \\ h_2(X) &= X \end{aligned}\right\} \quad b_0+b_1X \qquad (b_0,b_1)\in\mathbb{R}^2$$

$$h_3(X) = \boxed{1(\xi_1 < X < \xi_2)\cdot X}$$

όχι απαραίτητα συνεχής $\quad X$

$$b_0\cdot 1 + b_1\cdot X + b_2\cdot 1(\quad)\cdot X$$

$$h_3(X) = (X-\xi_1)_+ : \begin{cases} X-\xi_1, & X-\xi_1>0 \\ 0, & X-\xi_1\le 0 \end{cases}$$



$$h_4(X) = (X-\xi_2)_+$$

$$\boxed{f(x) = b_1 h_1(x) + b_2 h_2(x) + b_3 h_3(x) + b_4 h_4(x)}$$

linear spline

με $K=2$ κόμβους

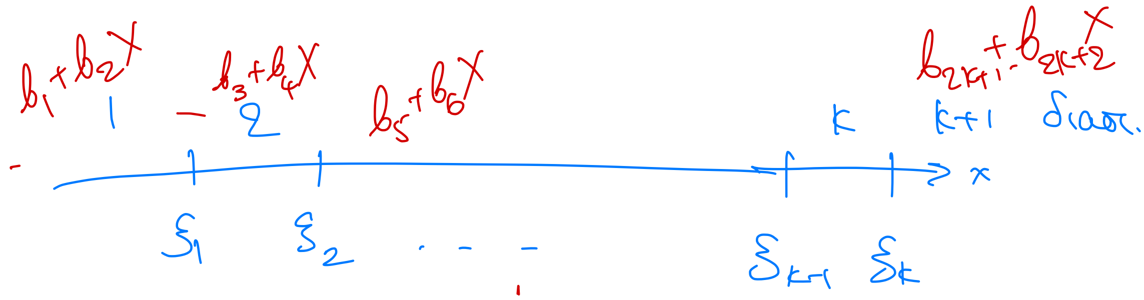
$$= b_1 + b_2 X + b_3 (X-\xi_1)_+ + b_4 (X-\xi_2)_+$$

$$= \begin{cases} \underline{b_1} + \underline{b_2} X & X < \xi_1 \\ b_1 + b_2 X + b_3 (X-\xi_1) = \underline{b_1 - b_3\xi_1} + \underline{(b_2+b_3)} X, & \xi_1 \le X < \xi_2 \\ b_1 + b_2 X + b_3 (X-\xi_1) + b_4 (X-\xi_2) = \underline{(b_1 - b_3\xi_1 - b_4\xi_2)} + \underline{(b_2 + b_3 + b_4)} X, & X \ge \xi_2 \end{cases}$$

συνεχής στα ξ_1, ξ_2 !

Για K κόμβους $\xi_1, \dots, \xi_K$ ($K+1$ διαστήματα)

Ποια είναι η διάσταση ?



Χωρίς περιορ. συνέχειας: $2\cdot(K+1)$ (intercept + slope σε κάθε διάστημα).

Αν επιβάλουμε περ. συνέχειας στα $\xi_1, \dots, \xi_K$. K περιορισμοί

$$\Rightarrow 2(K+1) - K = K+2$$

Spline $h_1(x) = 1$, $h_2 = X$, $h_3 = (X-\xi_1)_+$, $h_4 = (X-\xi_2)_+ \dots$

$h_{K+2} = (X-\xi_K)_+$

Πολυώνυμα $3^{ου}$ βαθμού

$x^2 + b_3 x^3$ $\qquad$ $x^2 + b_8 x^3$ $\qquad$ $x + b_{11} x^2 + b_{12} x^3$

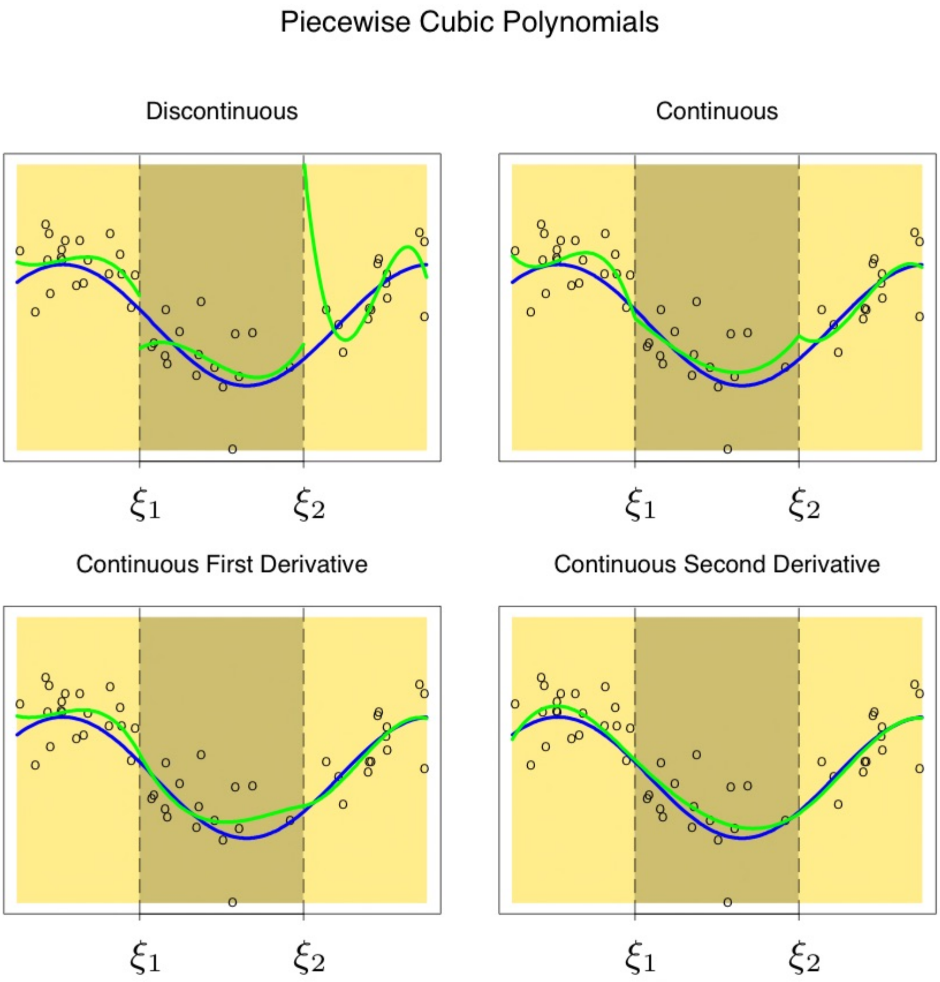


FIGURE 5.2. *A series of piecewise-cubic polynomials, with increasing orders of continuity.*