7-8.6.22

תרגול #11 מודלים ב'

Smoothing Splines

- בעיה: לא היינו רוצים להניח פרמטר, נבצע אמידה פרמטרית שמרווחת המקסימום פונקציית מטרה.

- מודל: נתונים $(X_1,Y_1),\dots,(X_n,Y_n)$ כך ש.

$$Y_j = f(X_j)+\varepsilon_j \quad ; \quad \varepsilon_j \overset{iid}{\sim} \quad \mathbb{E}\varepsilon_j = 0 \quad Var(\varepsilon_j)=1$$

$f:[0,1]\longrightarrow\mathbb{R}$ לא ידועה.

- אם ידוע של-f יש m נגזרות, נרצה להתאים פונקציה עם רמת חלקות דומה. כלומר כזו ששייכת למרחב סובולב $W_2^m([0,1])$ של פונק' גזירות חלש m פעמים עם נורמה סופית $\|f\|_{m,2}=\|f^{(m)}\|_2<\infty$.

לא ניתן לפתור בעיה זו כך: נמזער את הפונקציונל

$$J_m(f) := \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\left(Y_j - f(X_j)\right)^2 + \underbrace{\overset{\text{tuning parameter}}{\lambda}\|f^{(m)}\|_2^2}_{\text{penalty}}$$

על המרחב $W_2^m([0,1])$.

$\lambda\to 0$: overfitting

$\lambda\to\infty$: underfitting

- נראה שהפתרון (המזער optimizer) של $J_m(f)$ הוא פונקציה פולינומיאלית למקוטעין, מה שהופך את הבעיה ממש מאופטימיזציה בגודל אינסופי לאופטימיזציה בגודל סופי.

הגדרה: Spline מסדר r עם Knots $x_1<\dots<x_K$ הוא פונקציה פולינומיאלית למקוטעין מהצורה

$$S(x) = \sum_{j=0}^{r-1}\theta_j x^j + \sum_{j=1}^{K}\eta_j (x-x_j)_+^{r-1} \quad ; \theta_j,\eta_j\in\mathbb{R} \quad ; x_+ = 0\vee x$$

תכונות:
- פולינום מדרגה $r-1$ על כל אינטרוול $[x_{j-1},x_j]$.
- $r-2$ נגזרות רציפות
- רציפה ב- knots הם מחוברים
- הקבוצה $S^r(x_1,\dots,x_K)$ של כל ה-splines מסדר r עם knots $x_1,\dots,x_K$ היא מרחב ליניארי ממימד $r+K$ הנפרש ע"י הפונקציות

$$1, x, \dots, x^{r-1}, (x-x_1)_+^{r-1}, \dots, (x-x_K)_+^{r-1}$$

* לסמנו: פתרון לבעיית האופטימיזציה שלנו שייך לתת-מרחב n-מימדי של splines עם $r=2m$, $K=n$ (ה-knots הם הנקודות x_j) עם הדרישה הנוספת ש- $s(x)$ היא פולינום מדרגה $m-1$ מחוץ לאינטרוול $[x_1,x_n]$.

* תת-מרחב זה נקרא natural spline המסומן כ- $NS^{2m}(x_1,\dots,x_n)$: תת-מרחב ליניארי ממד n
(כמובן שהתנאי הנוסף נותן ש- $\theta_m=\dots=\theta_{2m-1}=0$.)

משפט 1.2: יהי $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ בסיס כלשהו של $NS^{2m}(x_1,\dots,x_n)$. אז המטריצה $\Phi\in\mathbb{R}^{n\times n}$ עם כניסות

$$\Phi_{ij}=\varphi_j(x_i)\quad ; \; i,j\in\{1,\dots,n\}$$

היא לא סינגולרית ולבעיה:

$m\le n$
$v\in\mathbb{R}^n$ fixed
$x_1,\dots,x_n$ knots

$$\text{minimize } \|f^{(m)}\|_2^2 \text{ over } W_2^m([0,1]) \qquad (P)$$
$$\text{s.t. } f(x_j)=v_j \; ; \; j=1,\dots,n$$

יש פתרון יחיד: $f(x)=\sum_{j=1}^n b_j\varphi_j(x)$ כאשר $b=\Phi^{-1}v$.

מסקנה: המינימייזר של הפונקציונל $J_m(f)$ מעל $W_2^m([0,1])$ הוא spline טבעי ב- $NS^{2m}(x_1,\dots,x_n)$.

משפט 1.4:
יהי $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ בסיס כלשהו של $NS^{2m}(x_1,\dots,x_n)$. ונגדיר את המטריצות $n\times n$ Φ,Ω עם

$$\Phi_{ij}=\varphi_j(x_i)\quad ; \quad \Omega_{ij}=\langle\varphi_i^{(m)},\varphi_j^{(m)}\rangle$$

בנוסף, נניח כי $m\le n$. אז המינימייזר היחיד של $J_m(f)$ הוא ה- spline הטבעי

$$\hat{f}(x)=\sum_{j=1}^n b_j\varphi_j(x)$$

כאשר b_j-ים הם כניסות הווקטור

$$b=(\Phi^T\Phi+n\lambda\Omega)^{-1}\Phi^T Y.$$

1) הוכיחו שהפונקציות $1, x, \dots, x^{r-1}, (x-x_1)_+^{r-1}, \dots, (x-x_k)_+^{r-1}$ יוצרות בסיס ל- $S^r(x_1,\dots,x_k)$.

פתרון: כדי להראות שהקבוצה היא בסיס, צריך להראות שהיא בת"ל ופורשת.

פורשת: כיון שהאיברים $S(x)$ הם מהצורה:

$$S(x)=\sum_{j=0}^{r-1}\theta_j x^j + \sum_{j=1}^{k}\eta_j (x-x_j)_+^{r-1} \quad ; \theta_j, \eta_j \in \mathbb{R}$$

אז מההגדרה $S^r(x_1,\dots,x_k)$ נפרשת ע"י $1, x, \dots, x^{r-1}, (x-x_1)_+^{r-1}, \dots, (x-x_k)_+^{r-1}$, כי אפשר להציג כל פונ' $S(x)$ כצירוף לינארי של הפונקציות הנ"ל.

בת"ל: צריך להראות שאם

$$\circledast \quad \sum_{j=0}^{r-1}\theta_j x^j + \sum_{j=1}^{k}\eta_j (x-x_j)_+^{r-1} = 0 \quad \forall x\in\mathbb{R}$$

אז $\theta_j=0$ וגם $\eta_j=0$ לכל j.

נסתכל על $0<t_0<\dots<t_{r-1}$ כך ש- $t_{r-1}<\min_j x_j$. אם נציב את הנקודות האלה ב- $\circledast$, אז הסכום השני מתאפס ונקבל את מערכת המשוואות

$$V\theta=0 \quad ; \theta=(\theta_0,\dots,\theta_{r-1}) \quad ; V\in\mathbb{R}^{r\times r}$$

והמטריצה V היא עם רכיבים $V_{ij}=t_i^j$ עבור $i,j\in\{0,\dots,r-1\}$.
כלומר V היא בדיוק מטריצת Vandermonde וכיון שכל ה-t_i שונים אז V הפיכה (דטרמיננטה שונה מ-0) ולכן $\theta=0$.

עכשיו שראינו ש- $\theta=0$, נראה לגבי הסכום השני:
נסתכל על $x_1<y_1<x_2$, אז המשוואה הראשונה הופכת ל-

$$\eta_1\underbrace{(y_1-x_1)_+^{r-1}}_{\neq 0}=0$$

ולכן בהכרח $\eta_1=0$.

באופן דומה נסתכל על $x_j<y_j<x_{j+1}$ ונקבל כי $\eta_j=0$ לכל j, כנדרש. ∎

שאלה ג: הסבירו מדוע $NS^{2m}(x_1,\dots,x_n)$ הוא תת-מרחב ליניארי והראו שהמימד שלו הוא n

פתרון:

ת"מ ליניארי: נזכור קודם כל כי מרחב מכל פונקציות פולינומיאליות למקוטעין מדרגה $2m-1$ לכל היותר על האינטרוולים $[x_{j-1},x_j]$ ודרגה $m-1$ בקרניים (x_n,∞) $(-\infty,x_1)$

עבור נקודה x נתונה, אם ניקח קומבינציה ליניארית של פונקציות כאלו זה ישנה רק את המקדמים, אך לא את דרגת הפולינום באזורים השונים.

דהיינו, כל צירוף ליניארי של natural spline הוא natural spline, כנדרש.

מימד: * המימד של המרחב הכללי הוא $2m+n$.

* יש לנו פונקציות מהצורה

$$\sum_{j=0}^{2m-1}\theta_j x^j+\sum_{j=1}^{n}\eta_j(x-x_j)_+^{2m-1}$$

אם נדרוש דרגה $m-1$ בקרניים זה אומר ש-

$$\underbrace{\theta_m=\dots=\theta_{2m-1}=0}_{m\ \text{אילוצים}}$$

כלומר, זה מוריד את המימד ל- $2m+n-m=m+n$.

* עדיין אפשר לקבל פולינום מדרגה $2m-1$ בקרן (x_n,∞)!

אבל דהיינו הדרישה לדרגה $m-1$ בקרניים מוסיפה עוד m אילוצים.

ולכן מורידה את המימד ל- $(m+n)-n=n$, כנדרש.

המקדמים ~~...~~ יהיו קומבינציה ליניארית של $\theta_0,\dots,\theta_{m-1},\eta_1,\dots,\eta_n$,

לשם כך, ניקח $y\in(x_n,\infty)$, ונקבל

$$\sum_{j=0}^{m-1}\theta_j y^j+\sum_{j=1}^{n}\eta_j(y-x_j)^{2m-1}$$

נשאר n סדרים, לכן איברים אלו ונאפס את m אלה שמעליהם, לנו חזקה גדולה מ- $m-1$.

3: הוכח את משפט 1.4:

תזכורת:

המשפט עצמו: יהי $\varphi_1,\dots,\varphi_n$ בסיס כלשהו של $NS^{2m}(X_1,\dots,X_n)$. (נגדיר מטריצות) $n\times n$, Ω, Φ

כך ש: $\Phi_{ij}=\varphi_j(X_i)$ ונניח כי $m\le n$.

$$\Omega_{ij}=\langle\varphi_i^{(m)},\varphi_j^{(m)}\rangle$$

אז המנמזער היחיד של $J_m(f)$ הוא spline טבעי

$$\hat{f}(x)=\sum_{j=1}^{n}\underbrace{b_j}_{\text{מקדם}}\underbrace{\varphi_j(x)}_{\text{איבר בבסיס}}$$

כאשר b_j הן כניסות הווקטור

$$b=\left(\Phi^T\Phi+n\lambda\Omega\right)^{-1}\Phi^T y$$

$\Leftarrow$ במשפט שראינו בהתחלה ולפי המסקנה מהמשפט, ניתן להסיק את החלק של שהמנמזער יחיד והוא spline טבעי. לכן נותר להראות כי אלה המקדמים.

$$\Rightarrow J_m(f)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\left(Y_k-f(X_k)\right)^2+\lambda\|f^{(m)}\|_2^2=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\Big(Y_k-\underbrace{\sum_{j=1}^{n}b_j\varphi_j(X_k)}_{f(X_k)}\Big)^2+\lambda\Big\|\underbrace{\sum_{j=1}^{n}b_j\varphi_j^{(m)}}_{f^{(m)}}\Big\|_2^2$$

$\|\cdot\|_2^2=\langle\cdot,\cdot\rangle$ $\quad$ $\langle\lambda a,b\rangle=\lambda\langle a,b\rangle;\ \langle a+b,c\rangle=\langle a,c\rangle+\langle b,c\rangle$

* לפי הנוטציה, $\varphi_j(X_k)=\Phi_{kj}$. בנוסף, מהבילינאריות והלינאריות של מכפלה פנימית:

$$\Big\langle\sum_{j=1}^{n}b_j\varphi_j^{(m)},\sum_{j=1}^{n}b_j\varphi_j^{(m)}\Big\rangle=\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}b_ib_j\underbrace{\langle\varphi_i^{(m)},\varphi_j^{(m)}\rangle}_{\Omega_{ij}}$$

$$\Rightarrow J_m(f)=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\Big(Y_k-\sum_{j=1}^{n}b_j\Phi_{kj}\Big)^2+\lambda\sum_{j=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}b_ib_j\Omega_{ij}$$

$$\frac{\partial J_m(f)}{\partial b_l}=\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}-2\Big(Y_k-\sum_{j=1}^{n}b_j\Phi_{kj}\Big)\Phi_{kl}+2\lambda\sum_{j=1}^{n}b_j\Omega_{lj}$$

$$=-\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}Y_k\Phi_{kl}+\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}b_j\Phi_{kj}\Phi_{kl}+2\lambda\sum_{j=1}^{n}b_j\Omega_{lj}$$

בסוף נרצה להשוות את 0, ולכן חשוב לסדר את הביטוי.

$$=-\frac{2}{n}\sum_{k=1}^{n}Y_k\Phi_{kl}+2\sum_{j=1}^{n}b_j\Big(\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}\Phi_{kl}\Phi_{kl}+\lambda\Omega_{lj}\Big)$$

קיבלנו כי הגרדיאנט הוא מהצורה

$$\nabla_b J_m(f) = -\frac{2}{n}\Phi^T Y + \frac{2}{n}\left(\Phi^T\Phi + n\lambda\Omega\right)b$$

נשווה את הגרדיאנט ל-0 ונקבל:

$$b = \left(\Phi^T\Phi + n\lambda\Omega\right)^{-1}\underbrace{\Phi^T Y}$$

Φ היא מדרגה מלאה ולכן גם $\Phi^T\Phi$ מדרגה מלאה ובפרט הפיכה.

$$Rank(A^TA) = Rank(A)$$

ובנוסחה צריך להפוך רק את אחת המטריצות. (המטריצה שבה הסכום הפנימי)