Le spline di regressione

Data Mining
CLAMSES - University of Milano-Bicocca

Aldo Solari

Riferimenti bibliografici

- Bowman, Evers. Lecture Notes on Nonparametric Smoothing. § 3.2.1, 3.2.2, 3.2.4
- AS § 4.4.1, 4.4.2
- LKA § 4.5, 4.7
- HTF § 5.1, 5.2, Appendix: B-splines

Example 3.2 (Glucose levels in potatoes)

Example 3.3. Consider the data set simulated

Example 3.4 (Radiocarbon dating). radioc sm

Si consideri il modello di regressione polinomiale

$$\mathbb{E}(y) = B\beta$$

dove $y = (y_1, \ldots, y_n)^t$ e

$$B = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & \cdots & x_1^d \\ \cdots & \cdots & \cdots & \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^d \end{bmatrix}$$

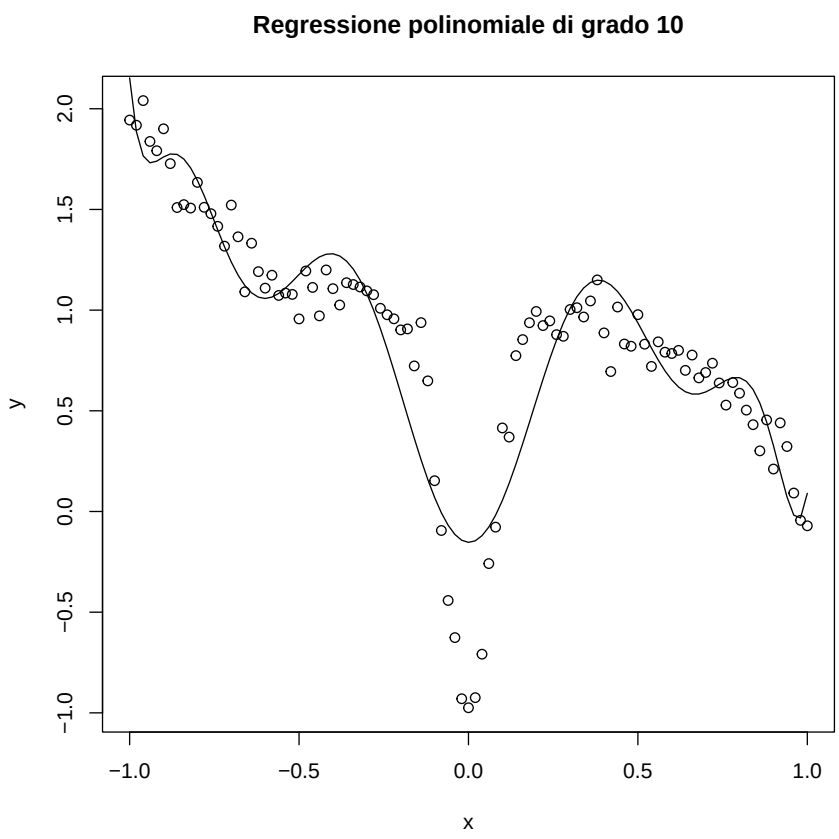
La stima di β è data da

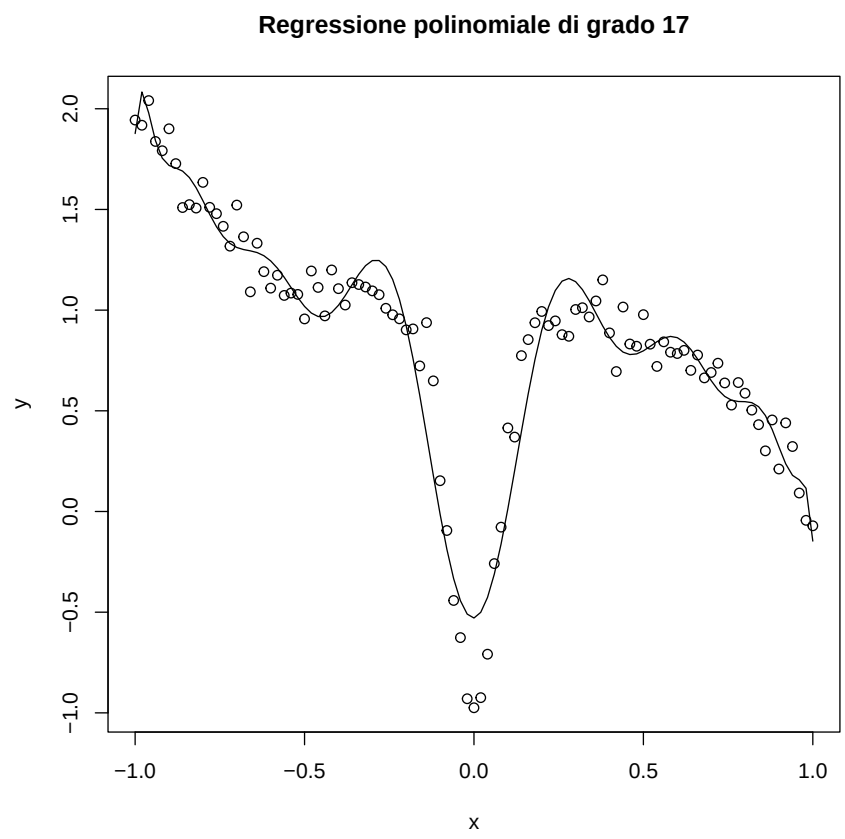
$$\hat{\beta} = (B^t B)^{-1} B^T y$$

Si stimi il modello per i dati simulati da

$$y_i = 1 - x_i^3 - 2\exp(-100x_i^2) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

dove $n = 101$, $x = (-1, .98, \ldots, 0.98, 1)^t$, e $\varepsilon_i \sim N(0, 0.1^2)$


Regressione polinomiale di grado 10
y
x
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0


Regressione polinomiale di grado 17
y
x
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0

La stima del modello è

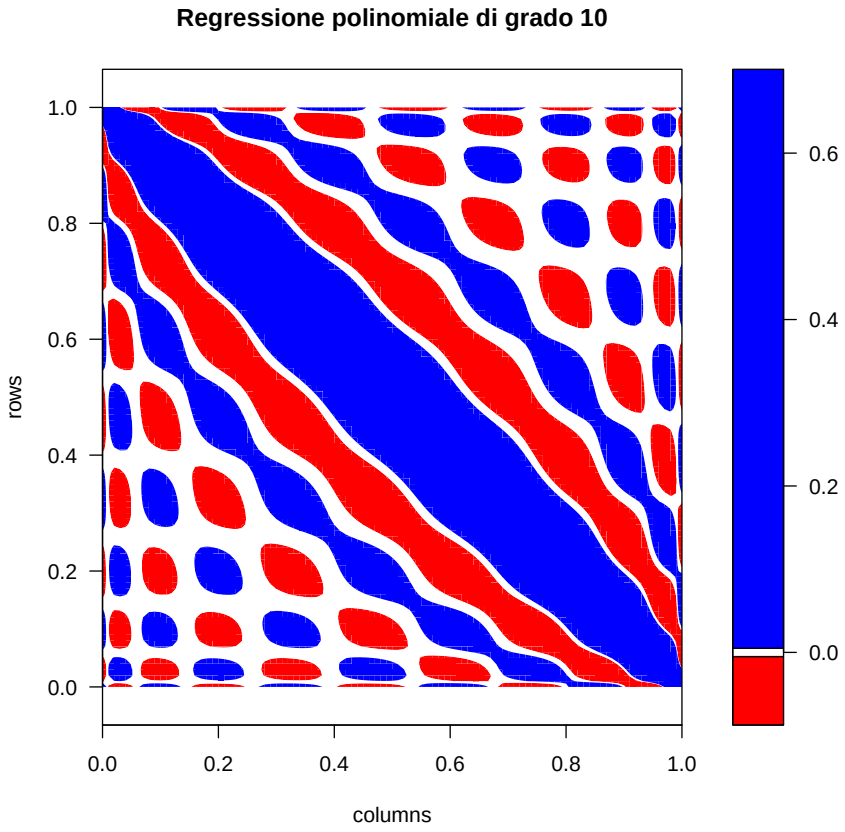
$$\hat{y} = B\hat{\beta} = B(B^tB)^{-1}B^ty = Sy$$

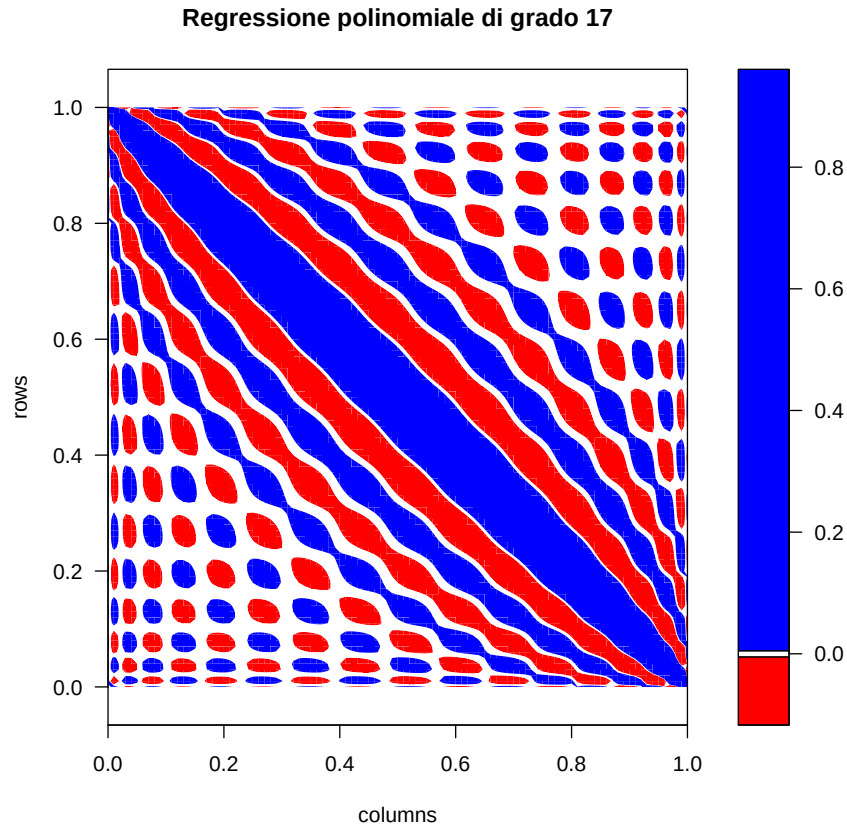
tuttavia la previsione in x_i, i.e. $\hat{y}_i$, non dipende solo da osservazioni vicine a x_i.

In altre parole, la matrice di proiezione S non ha una banda diagonale, quindi i polinomi non sono "locali"

Un altro problema problema è la stima alle estremità, con curvatura molto elevata che in genere non è supportata dai dati

Infine, il *condition number* per B^tB con la regressione polinomiale di grado 17 è $1.56 \cdot 10^{12}$


Regressione polinomiale di grado 10
rows
columns
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0


Regressione polinomiale di grado 17
rows
columns
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

Polinomio a tratti

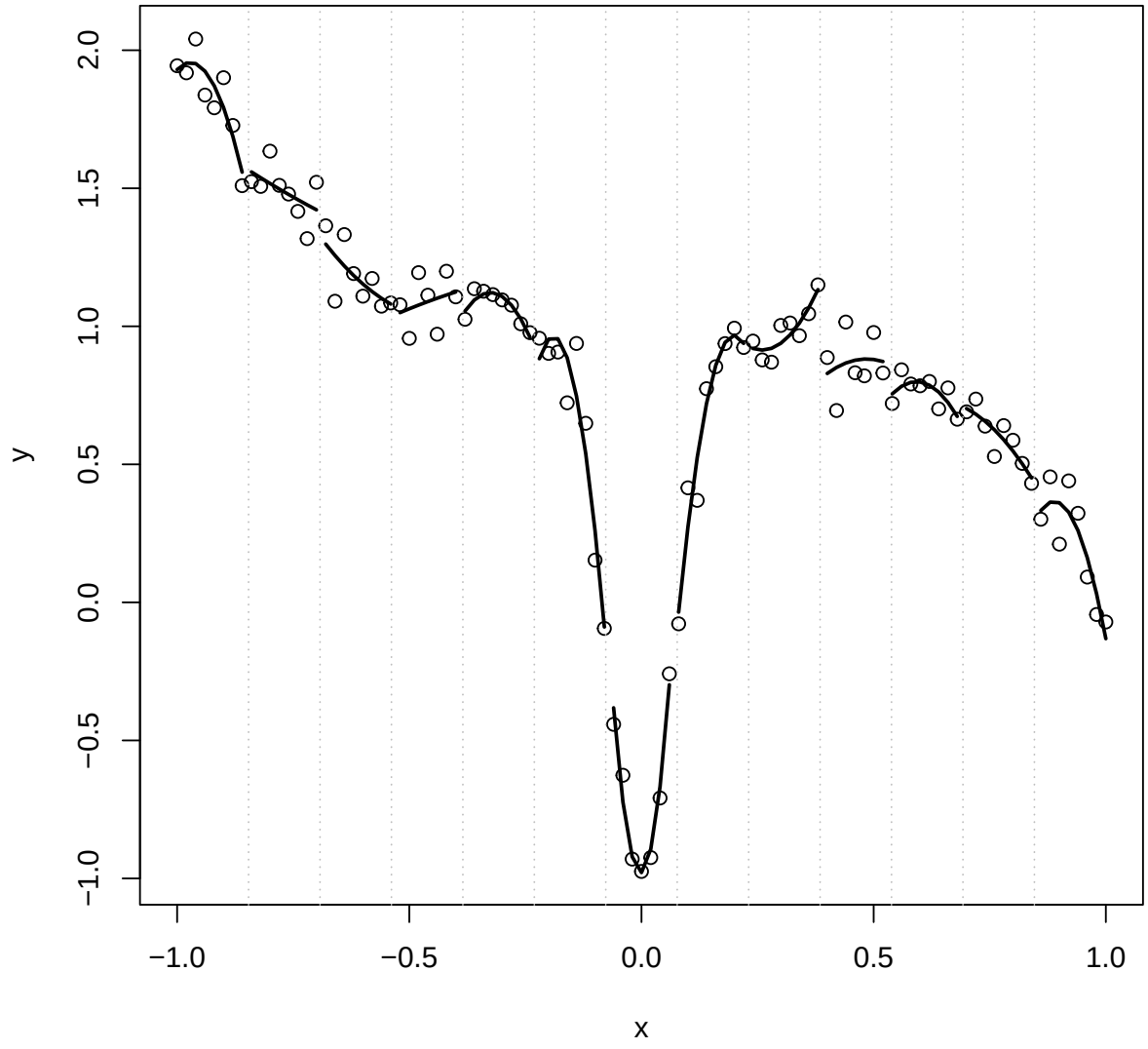
- Si dividono i dati in sottoinsiemi determinati da valori detti nodi (*knots*) e si stima un modello polinomiale all'interno di quel sottoinsieme di dati
- Si specificano K nodi interni (*internal knots*) nel *range* di x:

$$\min(x) < \xi_1 < \ldots < \xi_K < \max(x)$$

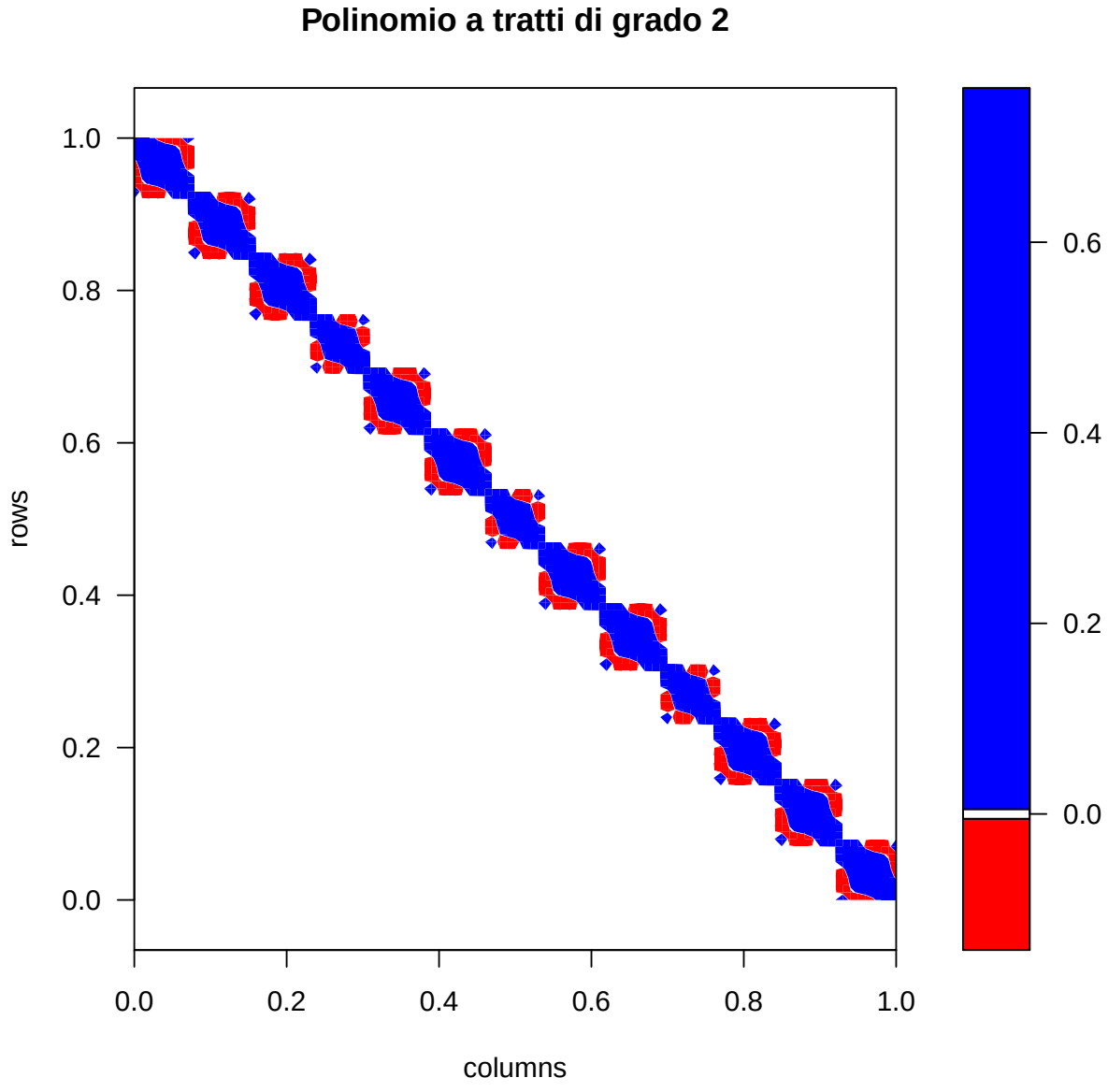
  che definiscono $K + 1$ intervalli
- Stima un modello polinomiale di grado M su ciascuno degli intervalli $K + 1$

$$(-\infty, \xi_1], (\xi_1, \xi_2], \ldots, (\xi_{K-1}, \xi_K], (\xi_K, +\infty)$$

- Un difetto è che i valori previsti ad ogni nodo non saranno continui



Polinomio a tratti ($M = 2$)



Matrice di lisciamento del polinomio a tratti di grado 2

Espansione di base

$$f(x) = \sum_{j=1}^{p} \beta_j B_j(x)$$

dove $B_j(\cdot)$ sono funzioni note dette funzioni di base (*basis functions*). Per esempio

- Polinomio di grado 3:

$$B_1(x) = 1, B_2(x) = x, B_3(x) = x^2, B_4(x) = x^3$$

- Funzione a gradini con K nodi:

$$B_1(X) = \mathbb{1}\{x < \xi_1\}, B_2(x) = \mathbb{1}\{\xi_1 \leq x < \xi_2\}, \ldots,$$
$$B_K(x) = \mathbb{1}\{\xi_{K-1} \leq x < \xi_K\}, B_{K+1}(x) = \mathbb{1}\{x \geq \xi_K\}$$

Storicamente, una spline era un righello elastico utilizzato per disegnare progetti tecnici, in particolare in costruzione navale e gli albori dell'ingegneria aeronautica

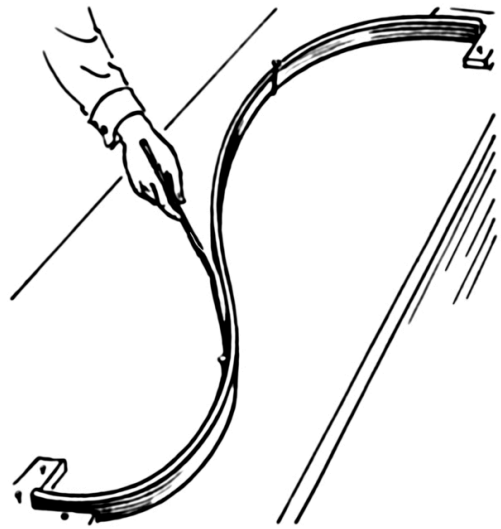


Figure 3.6. A spline.

Figura 3.6 da Bowman, Evers. Si veda anche https://pages.cs.wisc.edu/ deboor/draftspline.html

Spline di regressione

Una *spline* di grado M con nodi $\xi_1, \ldots, \xi_K$

- è un polinomio di grado M su ciascun intervallo

$$(-\infty, \xi_1], [\xi_1, \xi_2], [\xi_2, \xi_3], \ldots, [\xi_{K-1}, \xi_K], [\xi_K, \infty)$$

- ha derivate continue di ordine $0, \ldots, M-1$ in ciascun nodo

$$f(\xi_k^-) = f(\xi_k^+), \quad \ldots, \quad f^{(M-1)}(\xi_k^-) = f^{(M-1)}(\xi_k^+), \quad k = 1, \ldots, K$$

dove ξ_k^+ and ξ_k^- indica il limite sinistro e destro della funzione in ξ_k

Scelta del grado M

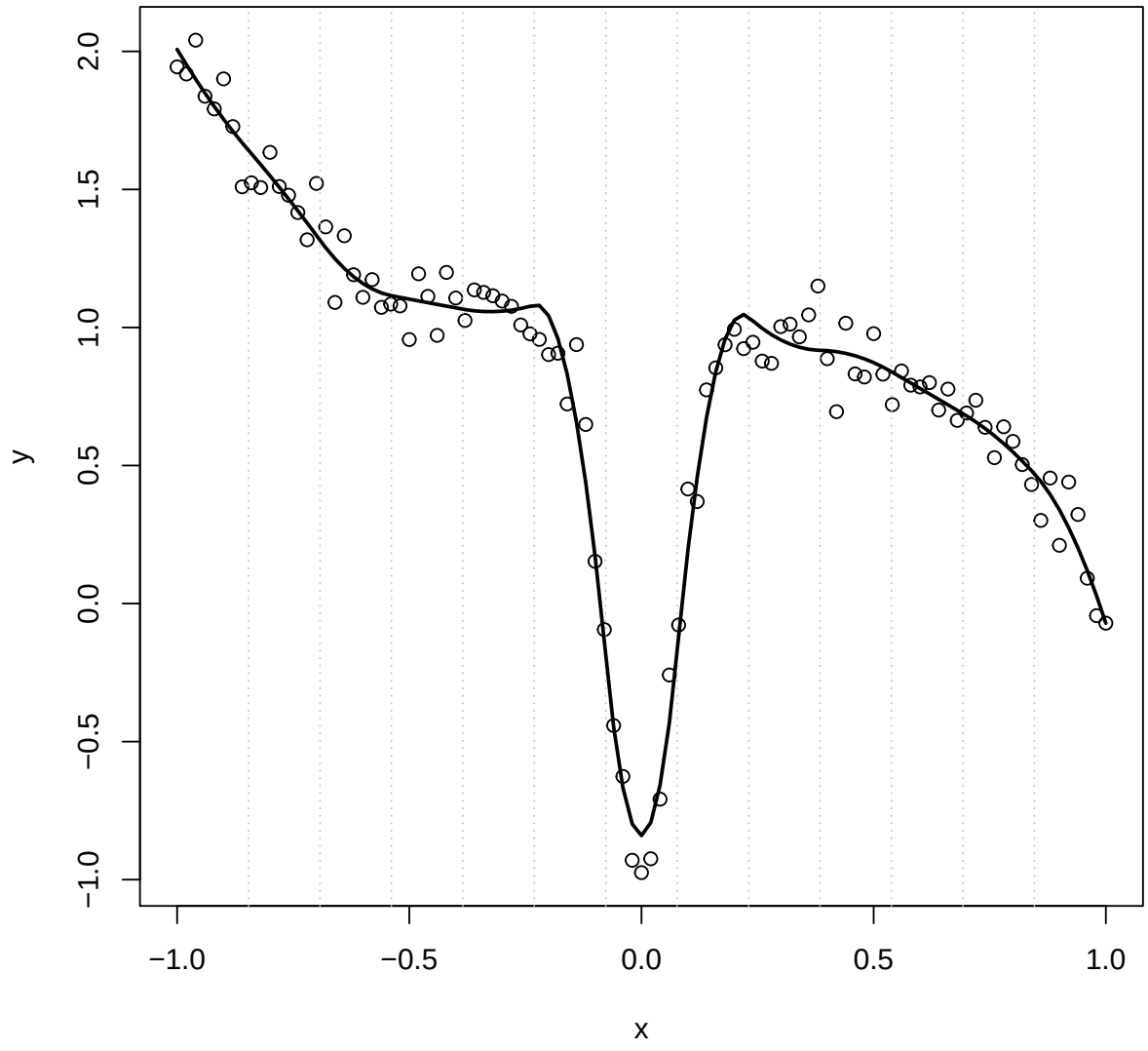
Il grado M della spline controlla il grado di lisciamento della funzione nel senso di controllarne la differenziabilità.

Per $M = 0$ la spline è una funzione a gradino discontinua.

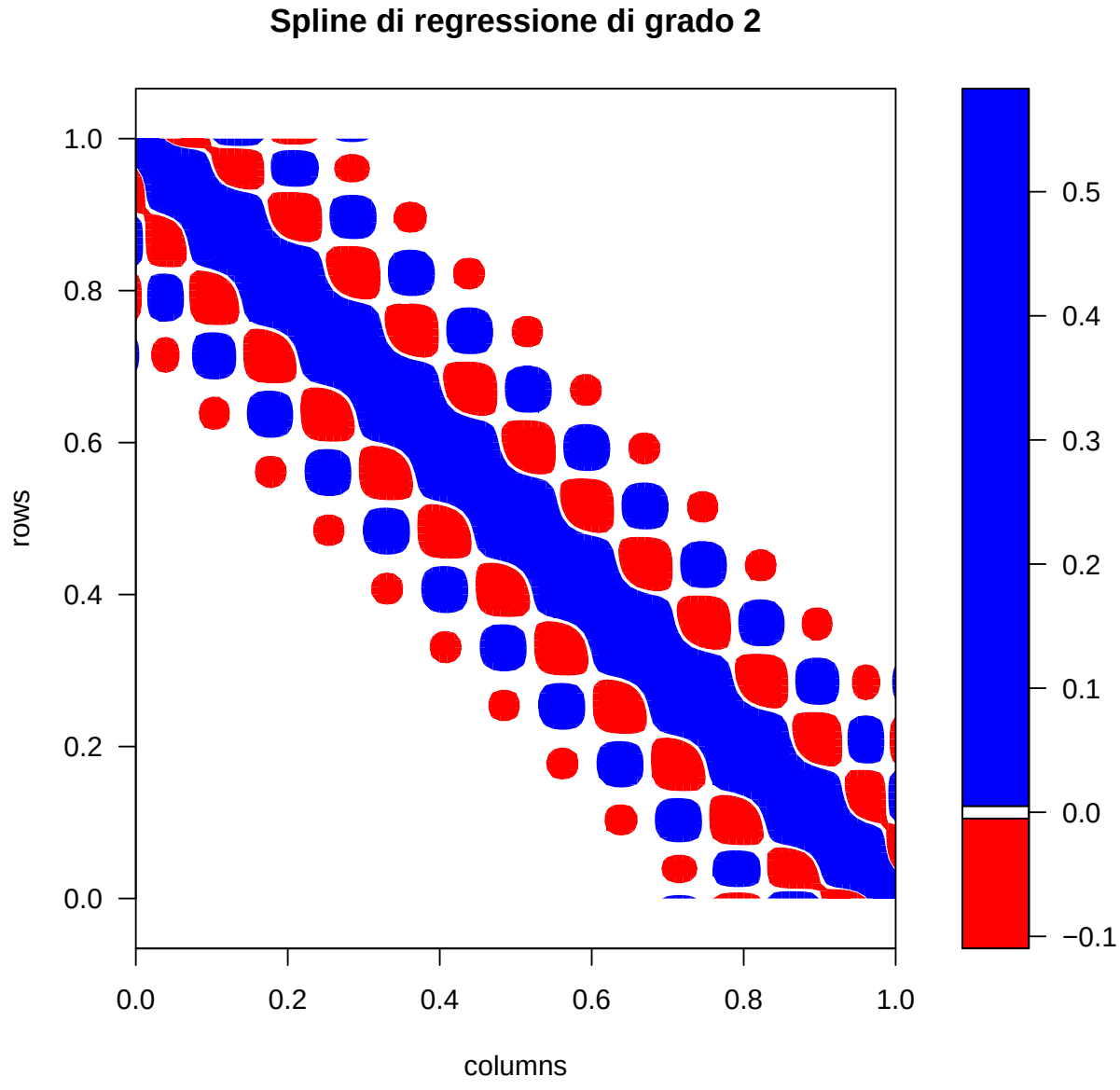
Per $M = 1$ la spline è una linea poligonale.

Per valori maggiori di M la spline aumenta il grado di lisciamento, ma si comporta sempre di più come un polinomio globale.

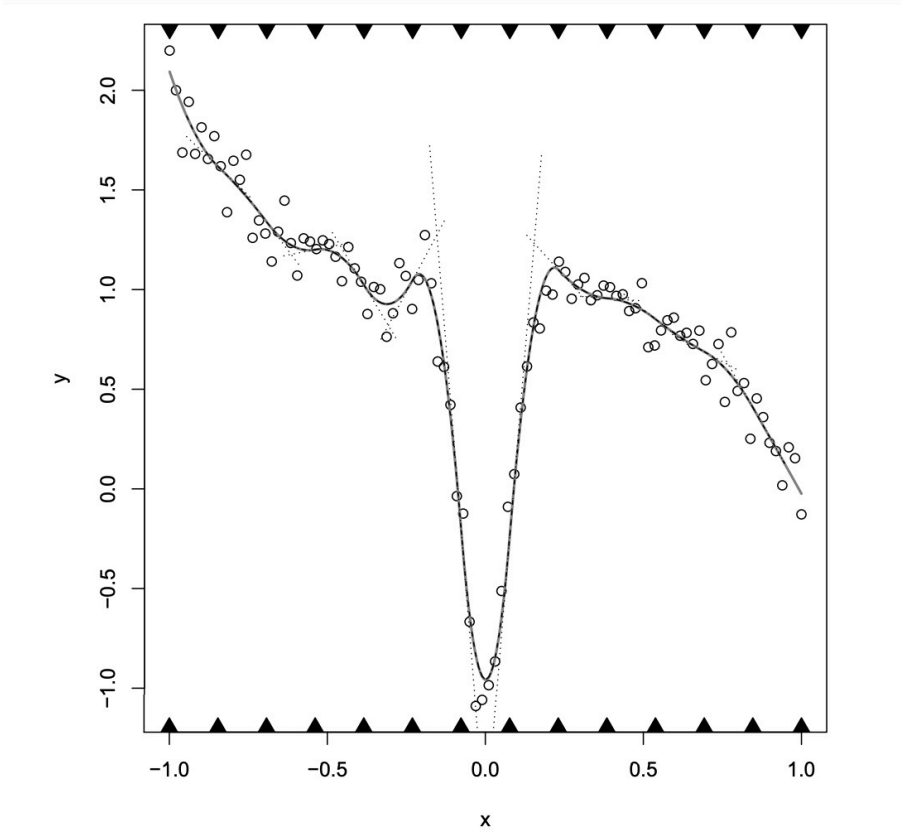
In pratica è raramente necessario andare oltre $M = 3$.



Spline di regressione di grado 2



Matrice di lisciamento della spline di regressione di grado 2



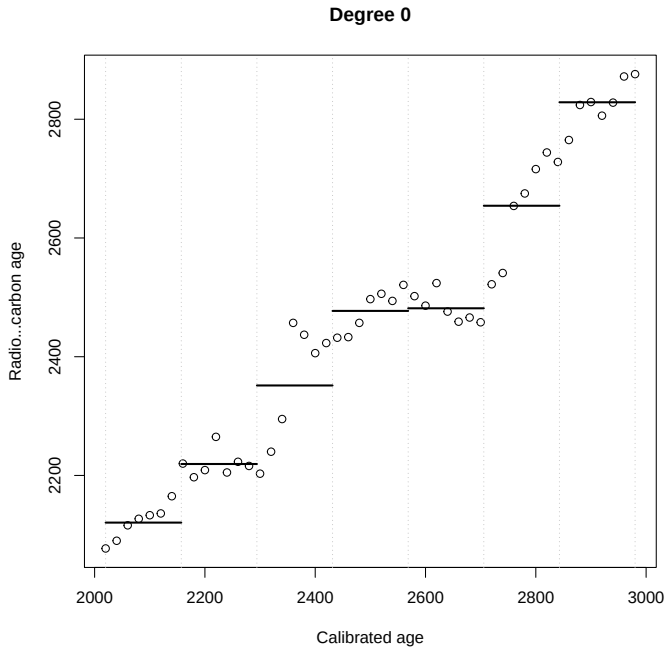
(b) Piecewise polynomials which form a continuously differentiable function (derivatives at knots shown as dashed lines)

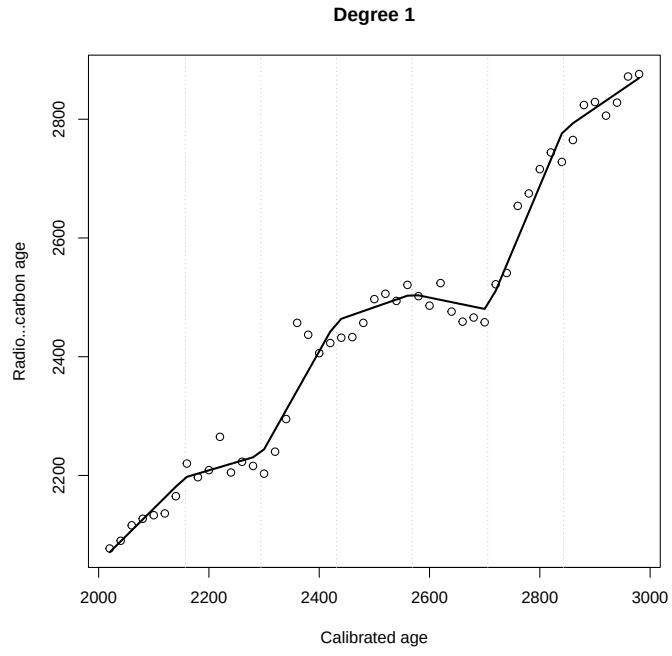
Figura 3.5(b) da Bowman, Evers

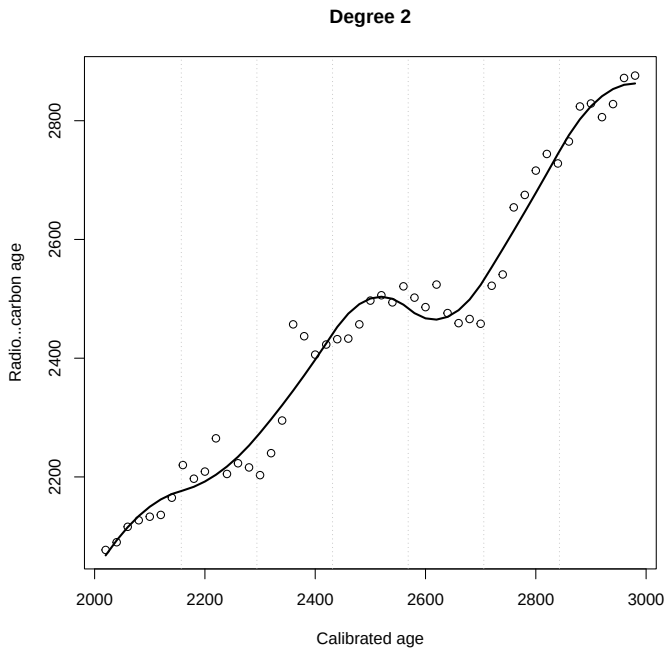
Radiocarbon dating

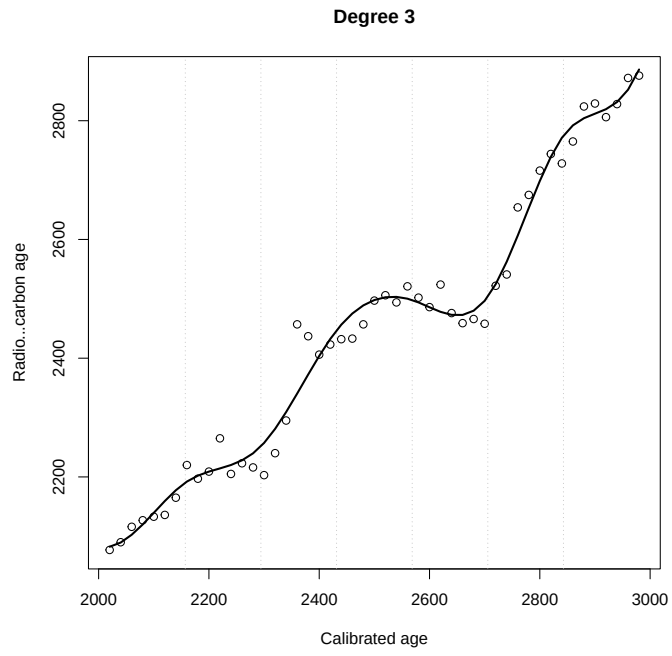
In un esperimento scientifico sono state eseguite misurazioni ad alta precisione del radiocarbonio sulla quercia irlandese.

Per costruire una curva di calibrazione dobbiamo conoscere la relazione tra l'età (prevista) dal radiocarbonio e l'età del calendario. La Figura 3.7 mostra gli adattamenti spline ai dati utilizzando spline di gradi diversi.


Degree 0
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


Degree 1
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


Degree 2
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


Degree 3
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000

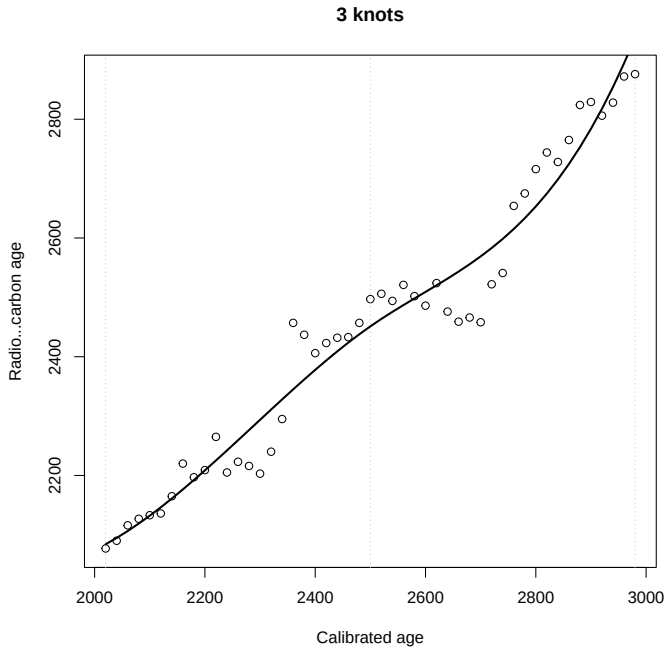
Scelta del numero/posizione dei nodi

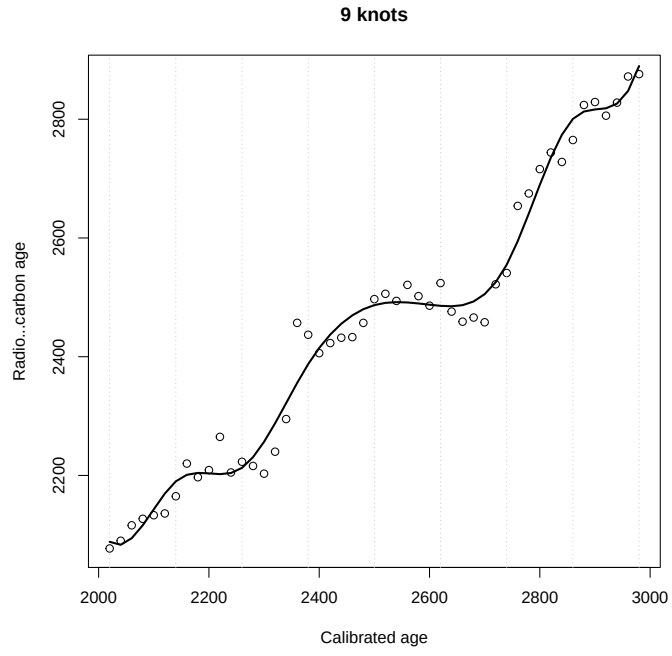
Più nodi vengono utilizzati, più flessibile è la funzione di regressione funzione può diventare. Come abbiamo visto in precedenza, una funzione di regressione più flessibile ha un bias inferiore, ma una varianza maggiore.

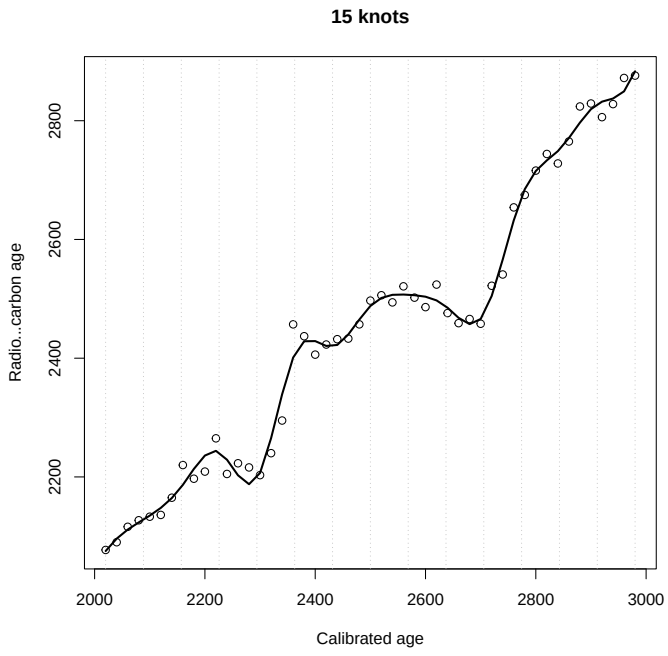
Soprattutto quando il numero di nodi K è basso, il posizionamento dei nodi è molto importante.

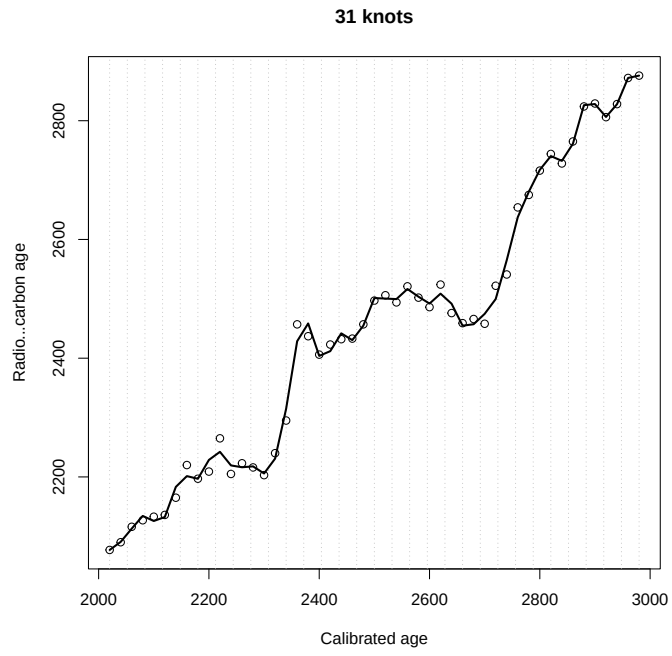
La strategia più semplice consiste nell'utilizzare un insieme di nodi equidistanti; questo è computazionalmente il più semplice.

In alternativa, possiamo posizionare i nodi secondo il quantili della covariata. Questo rende la spline più flessibile nelle regioni con più dati (e quindi potenzialmente più informazioni) e meno flessibile nelle aree con meno dati (e potenzialmente meno informazioni).


3 knots
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


9 knots
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


15 knots
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000


31 knots
Radio...carbon age
Calibrated age
2000
2200
2400
2600
2800
3000

Spline come spazio vettoriale

Per un dato insieme di K nodi e dato il grado M, lo spazio delle spline polinomiali è uno spazio vettoriale.

Per trovare la dimensione di questo spazio vettoriale dobbiamo trovare il numero di parametri liberi.

Ogni polinomio ha $M+1$ parametri e ci sono $K+1$ polinomi.

Tuttavia non possiamo scegliere tutti questi parametri liberamente, poiché la funzione risultante deve soddisfare K vincoli di differenziabilità di ordine $0, \ldots, M-1$

$$(M+1)(K+1) - KM = 1 + M + K$$

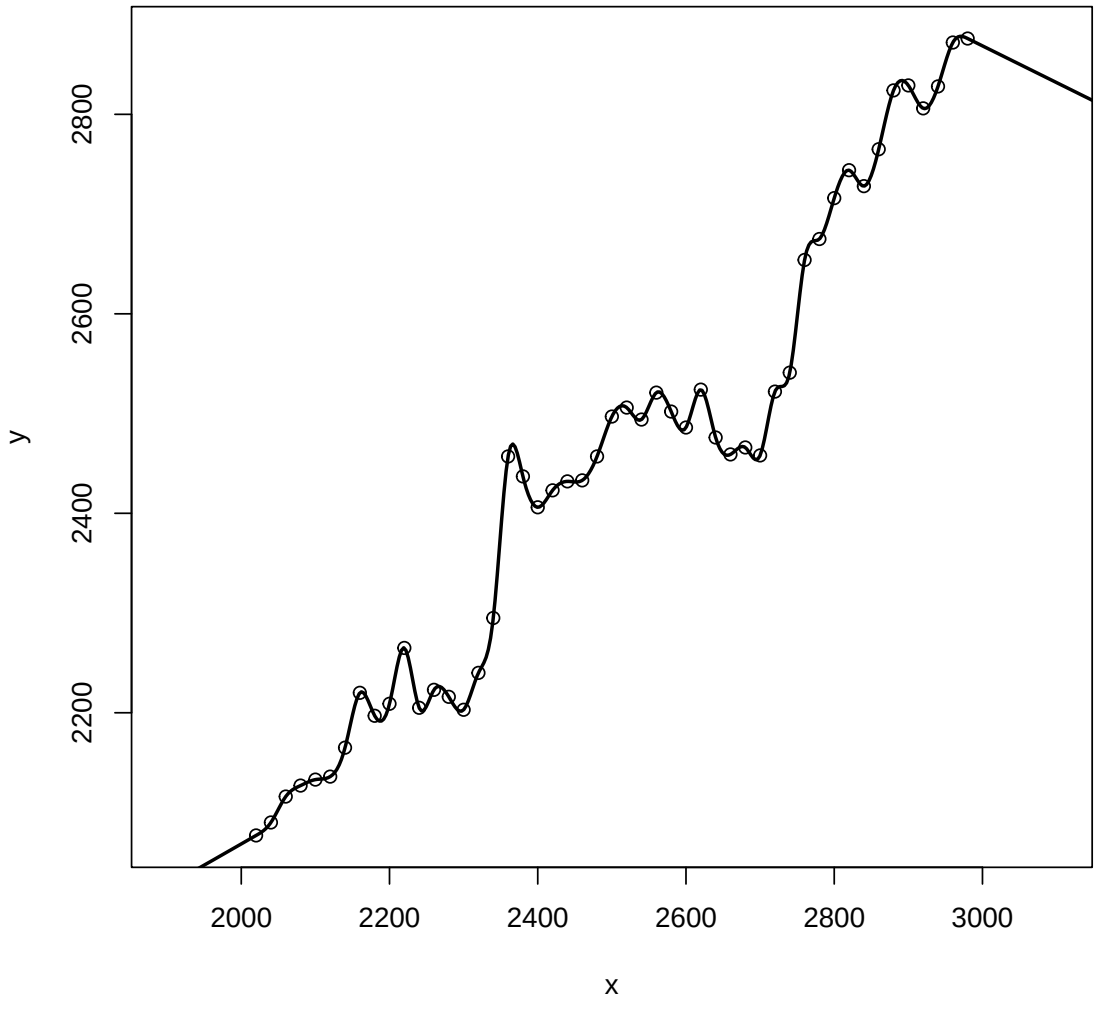
Spline cubiche naturali

Una spline polinomiale $f : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$ di grado 3 è detta spline cubica naturale se $f''(a) = f''(b) = 0$

Dato un insieme di K nodi lo spazio vettoriale di tutte le spline cubiche ha dimensione $K + 4$.

Le spline cubiche naturali introducono quattro vincoli aggiuntivi, quindi formano uno spazio vettoriale di dimensione K. Ciò rende le spline cubiche naturali perfettamente adatte all'interpolazione

Un insieme di n punti (x_i, y_i) può essere interpolato esattamente usando una spline cubica naturale con $x_{(2)} < \ldots < x_{(n-1)}$ come nodi (interni). La spline cubica naturale di interpolazione è unica.


2800
2600
2400
2200
y
2000
2200
2400
2600
2800
3000
x

Costruzione delle spline

Ora studieremo due modi di costruire una base per lo spazio vettoriale di spline polinomiali: la base delle potenze troncate e la base delle B-spline

Base delle potenze troncate

Una spline di grado M con nodi $\xi_1, \ldots, \xi_K$ può essere definita dalla base delle potenze troncate (*truncated power basis*)

$$\begin{aligned} B_1(x) &= 1 \\ B_{j+1}(x) &= x^j, \quad j = 1, \ldots, M \\ B_{M+k+1}(x) &= (x - \xi_k)_+^M, \quad k = 1, \ldots, K \end{aligned}$$

dove $(\cdot)_+$ è definito come

$$(x - \xi_k)_+^M = \begin{cases} (x - \xi_k)^M & x \geq \xi_k \\ 0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$

Costruiamo quindi la matrice del disegno B di dimensione $n \times (1 + M + K)$ con

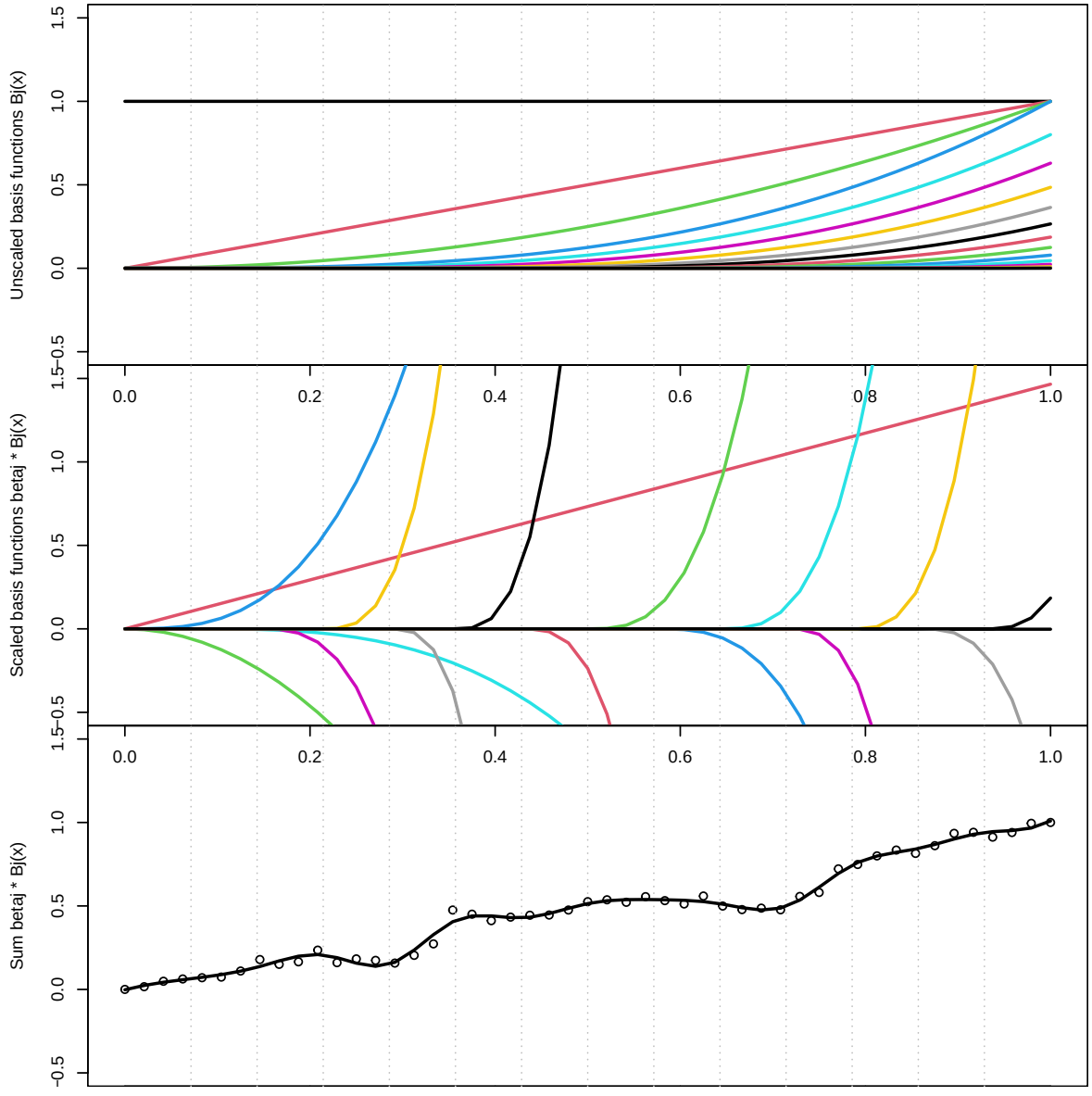
$$B_{i,j} = B_j(x_i) \qquad i = 1, \ldots, n, \quad j = 1, \ldots, 1 + M + K$$

Possiamo scrivere la spline di regressione come

$$\hat{f}(x) = \sum_{j=1}^{1+M+K} \hat{\beta}_j B_j(x)$$

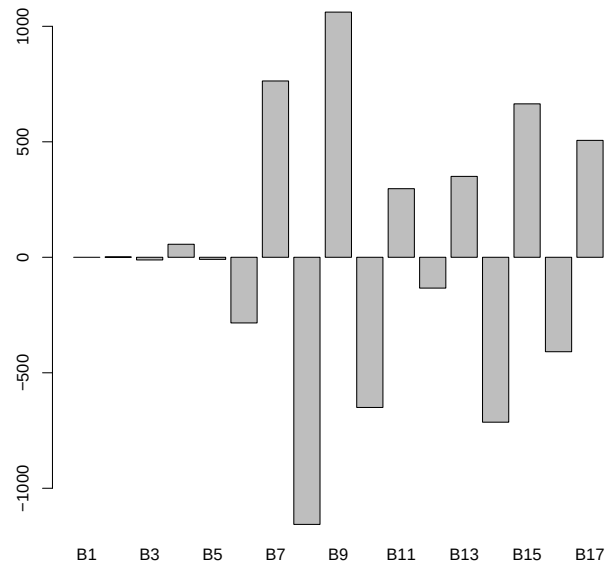
dove $\hat{\beta}$ è dato da

$$\hat{\beta} = (B^t B)^{-1} B^t y$$


Unscaled basis functions Bj(x)
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
Scaled basis functions betaj * Bj(x)
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
Sum betaj * Bj(x)

Alcune stime dei coefficienti sono molto elevate, e le funzioni di base sono scalate di un fattore superiore a 1000, con funzioni di base "vicine" di segno opposto.

La ragione di ciò è l'elevata correlazione tra le colonne della matrice del disegno B costruita con la base delle potenze troncate. La correlazione massima tra le colonne è 0.9990216.



Base B-spline

Il *condition number* di B^tB è 3.459309e+24, ovvero B^tB è quasi numericamente singolare. Questo comporta che la stima dei minimi quadrati dei coefficienti è prossima ad essere numericamente instabile

Le B-spline costituiscono una base numericamente più stabile. L'idea chiave delle B-spline è usare funzioni di base che sono locali, cioè diverse da zero per una "piccola" proporzione dell'intervallo della covariata e che sono delimitate superiormente.

Le B-spline si possono calcolare come differenza di funzioni di potenza troncate

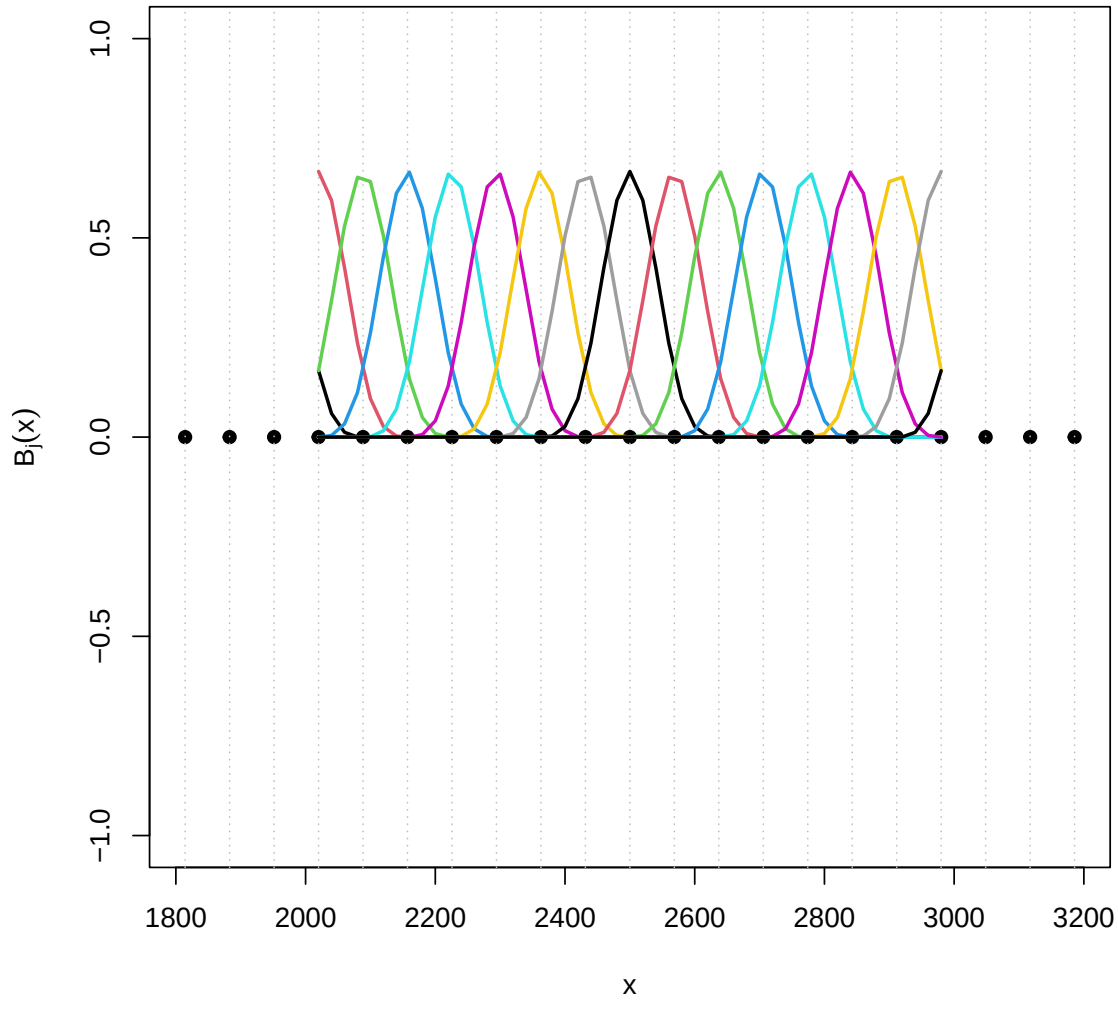
La formula generale per nodi equispaziati è

$$B_j(x) = \frac{(-1)^{M+1}\Delta^{M+1} f_j(x, M)}{h^M M!}$$

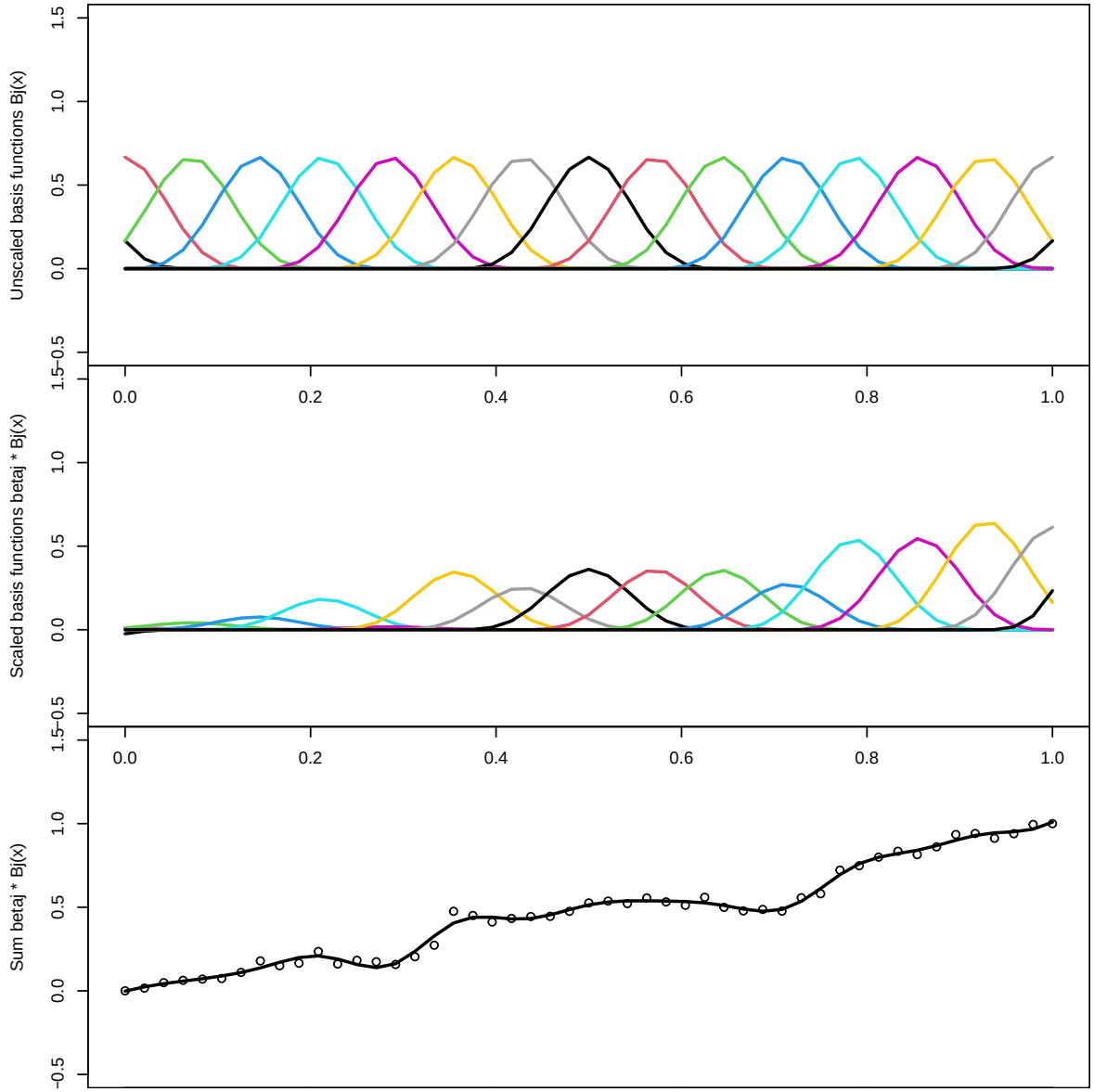
che soddisfano

$$\sum_j B_j(x) = 1$$

dove $f_j(x, M) = (x - \xi_j)_+^M$, hè la distanza tra i nodi e Δ^O è la differenza di ordine O con $\Delta f_j(x, M) = f_j(x, M) - f_{j-1}(x, M)$, $\Delta^2 f_j(x, M) = \Delta(\Delta f_j(x, M)) = f_j(x, M) - 2f_{j-1}(x, M) + f_{j-2}(x, M)$



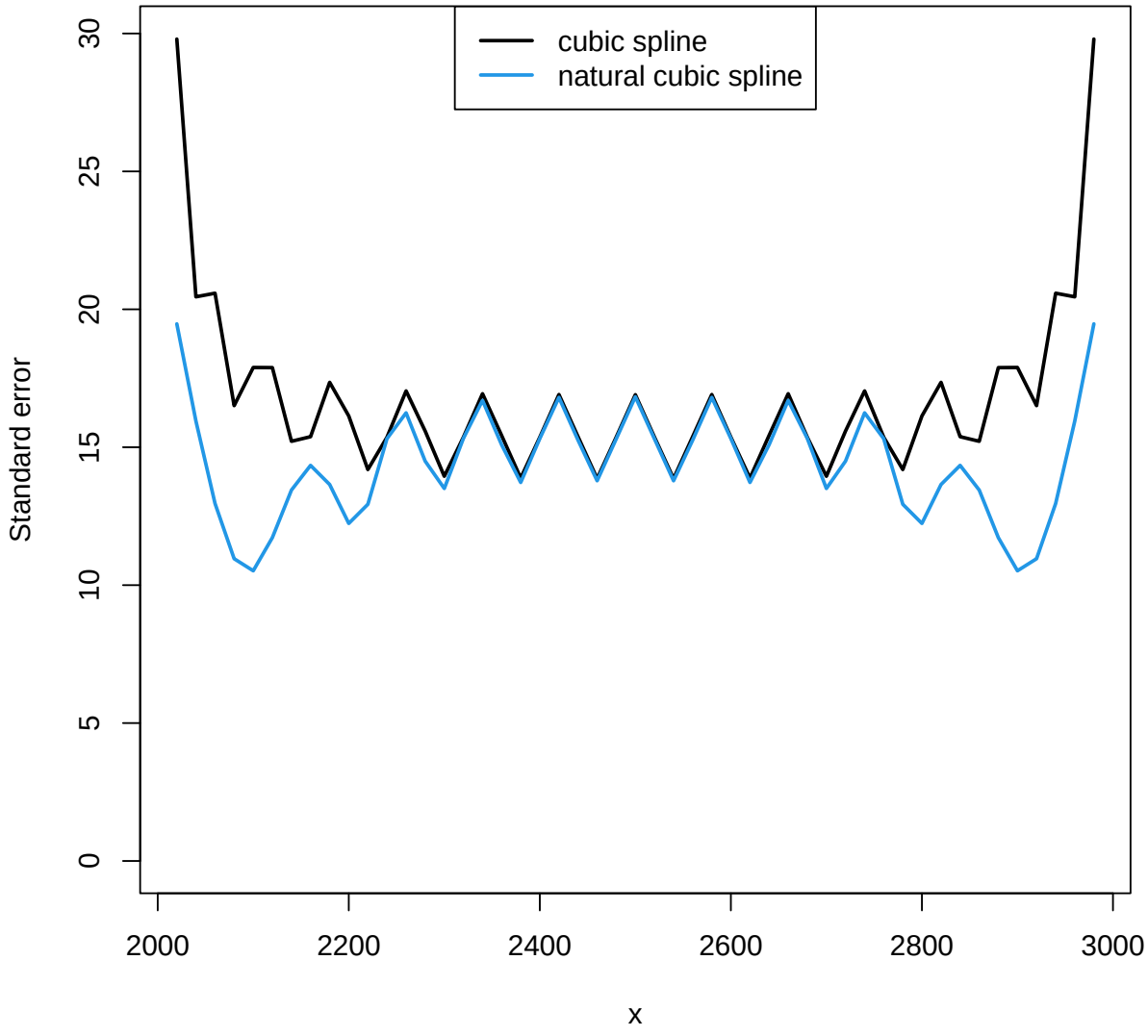
Base *B*-spline con nodi equispaziati


Unscaled basis functions Bj(x)
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
Scaled basis functions betaj * Bj(x)
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
Sum betaj * Bj(x)
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5

Spline cubiche naturali

Una spline cubica naturale con K nodi è rappresentata da K funzioni di base

$$
\begin{aligned}
B_1(x) &= 1 \\
B_2(x) &= x \\
B_{j+2}(x) &= \frac{(x-\xi_j)_+^3 - (x-\xi_K)_+^3}{\xi_K - \xi_j} - \frac{(x-\xi_{K-1})_+^3 - (x-\xi_K)_+^3}{\xi_K - \xi_{K-1}} \\
&\qquad j = 1, \ldots, K-2
\end{aligned}
$$



Standard error of the fit