5.5. 平滑化パラメータの自動選択

平滑化スプラインは、ほとんど**3次**である。

→ **データへのあてはめの良さ(第1項)** と **関数の歪曲度(第2項)** を調整する為に、
罰則パラメータλを選択することが重要である。

$$RSS(f, \lambda) = \sum_{i=1}^{N} \{y_i - f(x_i)\}^2 + \lambda \int \{f''(t)\}^2 dt \tag{5.9}$$

一方、回帰スプラインでは、

1. スプラインの**次数**
2. 接点の**数**
3. 接点の**配置**

の3つの要素が平滑化パラメータとして含まれる。
このパラメータを選択する事は複雑なタスクであり、MARSを使った近似解を使う。

5.5.1. 固定自由度

平滑化スプラインでは、$df_\lambda = trace(\mathrm{S}_\lambda)$ はλに関して単調である。
→ **dfを固定**すれば、λを指定可能。

実際には、いくつかの異なるdfを試して、近似的なf検定統計量や残差の図示等で、1つのdfを選択する。特にGAM等で有効である。

- **一般化加法的モデル(GAM)** ... 各説明変数の一般的な変換の総和

$$y = \alpha + f_1(x_1) + f_2(x_2) + \ldots + f_n(x_n) + \varepsilon$$

5.5.2. バイアスと分散のトレードオフ

スプラインにおいても、**バイアスと分散**の間に**トレードオフ**が存在する。

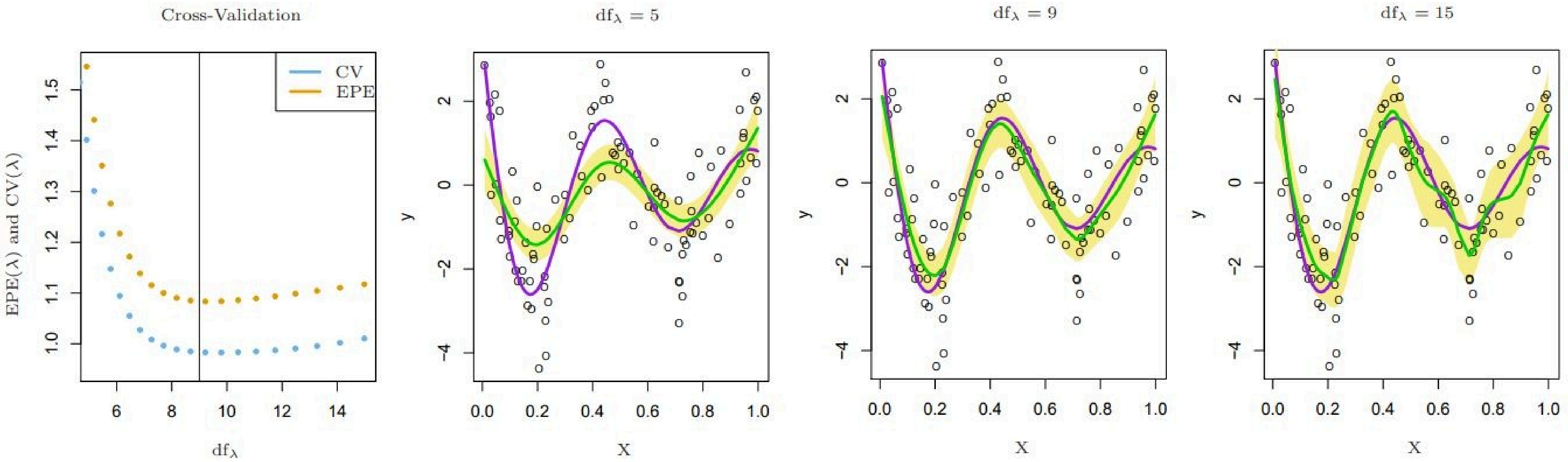
- df_λを**小さすぎる値**で当てはめると、真の関数とは異なる予測をしてしまう。
(= バイアスが大きくなる / **過小適合**)
- df_λを**大きすぎる値**で当てはめると、予測が個々の標本に引っ張られやすくなる。
(= 分散が大きくなる / **過剰適合**)

次ページに、以下の式で表される**単純な平滑化スプライン**を用いた際のdf_λの選択を表す。ただし、$X \sim U[0,1]$、$\epsilon \sim N(0,1)$、$Cov(\hat{f})$の対角成分が分散であり、$Bias(\hat{f})$がバイアスである。

$$
\begin{aligned}
Y &= f(X) + \epsilon \\
f(X) &= \frac{\sin(12(X+0.2))}{X+0.2} && (5.22) \\
Cov(\hat{f}) &= \mathrm{S}_\lambda \mathrm{S}_\lambda^T && (5.23) \\
Bias(\hat{f}) &= \mathrm{f} - S_\lambda \mathrm{f} && (5.24)
\end{aligned}
$$

以下の当てはめで、次のような問題が発生している。

- $df_\lambda = 5$ では、**過小な**当てはめ
- $df_\lambda = 9$ は、適切な当てはめ
- $df_\lambda = 15$ では、**過剰な**当てはめ



期待2乗予測誤差EPE により、バイアスと分散を1つに結び付けられる。
ただし、$\hat{f}_\lambda$は訓練標本、予測点(X,Y)の両方で平均化したものである。

$$
\begin{aligned}
EPE(f_\lambda) &= E(Y - \hat{f}_\lambda(X))^2 \\
&= Var(Y) + E\left[Bias^2(\hat{f}_\lambda(X)) + Var(\hat{f}(X))\right] \\
&= \sigma^2 + MSE(\hat{f}_\lambda)
\end{aligned}
\tag{5.25}
$$

真の関数が未知なので、EPEは推測する必要がある。
推測の方法としては、**K分割交差確認やGCV, C_p** 等がある。

5.6. ノンパラメトリックロジスティック回帰

単一の定量的入力X に対するロジスティック回帰を考える。

ロジスティック関数$f(x)$による当てはめで、**滑らかな条件付き確率**$Pr(Y=1|x)$ を求めることができる。

$$\log \frac{Pr(Y=1|X=x)}{Pr(Y=0|X=x)} = f(x) \tag{5.28}$$

$$Pr(Y=1|X=x) = \frac{e^{f(x)}}{1+e^{f(x)}} \tag{5.29}$$

罰則付き対数尤度基準$l(f;\lambda)$ を、次式のように構成する。
ただし、$p(x) = Pr(Y = 1|x)$である。

$$
\begin{aligned}
l(f;\lambda) &= \sum_{i=1}^{N}[y_i \log p(x_i) + (1-y_i)\log(1-p(x_i))] - \frac{1}{2}\lambda \int \{f''(x)\}^2 dt \\
&= \sum_{i=1}^{N}[y_i f(x_i) + \log(1+e^{f(x_i)})] - \frac{1}{2}\lambda \int \{f''(x)\}^2 dt
\end{aligned}
\tag{5.30}
$$

この時、最適なfはxに接点を持つ自然スプラインなので、$f(x) = \sum_{j=1}^{N} N_j(x)\theta_j$

そして、1次と2次の導関数は以下のように表される。
ただし、pは$p(x_i)$を要素として持つN次元ベクトル、Wは重み$p(x_i)(1-p(x_i))$の対角行列である。

$$\frac{\vartheta l(\theta)}{\vartheta\theta} = N^T(y-p) - \lambda\Omega\theta \tag{5.31}$$

$$\frac{\vartheta^2 l(\theta)}{\vartheta\theta\vartheta\theta^T} = -N^T W N - \lambda\Omega \tag{5.32}$$

(5.31)は、**θについて非線形**であるため、反復的な計算が必要である。
ニュートン=ラフソン アルゴリズムを使って、$theta$の更新式を表せる。
ただし、作業応答変数zは重み付き平滑化スプラインへの当てはめ、S_λは回帰演算子である。

$$\begin{aligned}\theta^{new} &= (N^TWN + \lambda\Omega)^{-1}NW(N\theta^{old} + W^{-1}(y-p)) \\ &= (N^TWN + \lambda\Omega)^{-1}NWz\end{aligned} \tag{5.33}$$

$$\begin{aligned}f^{new} &= N(N^TWN + \lambda\Omega)^{-1}N^TW(f^{old} + W^{-1}(y-p)) \\ &= S_{\lambda,w}z\end{aligned} \tag{5.34}$$

ニュートン=ラフソン アルゴリズム ... 非線形方程式$f(x) = 0$を**数値的に解く方法**

5.7. 多次元スプライン

スプラインを多次元で扱うために、基底を追加する。

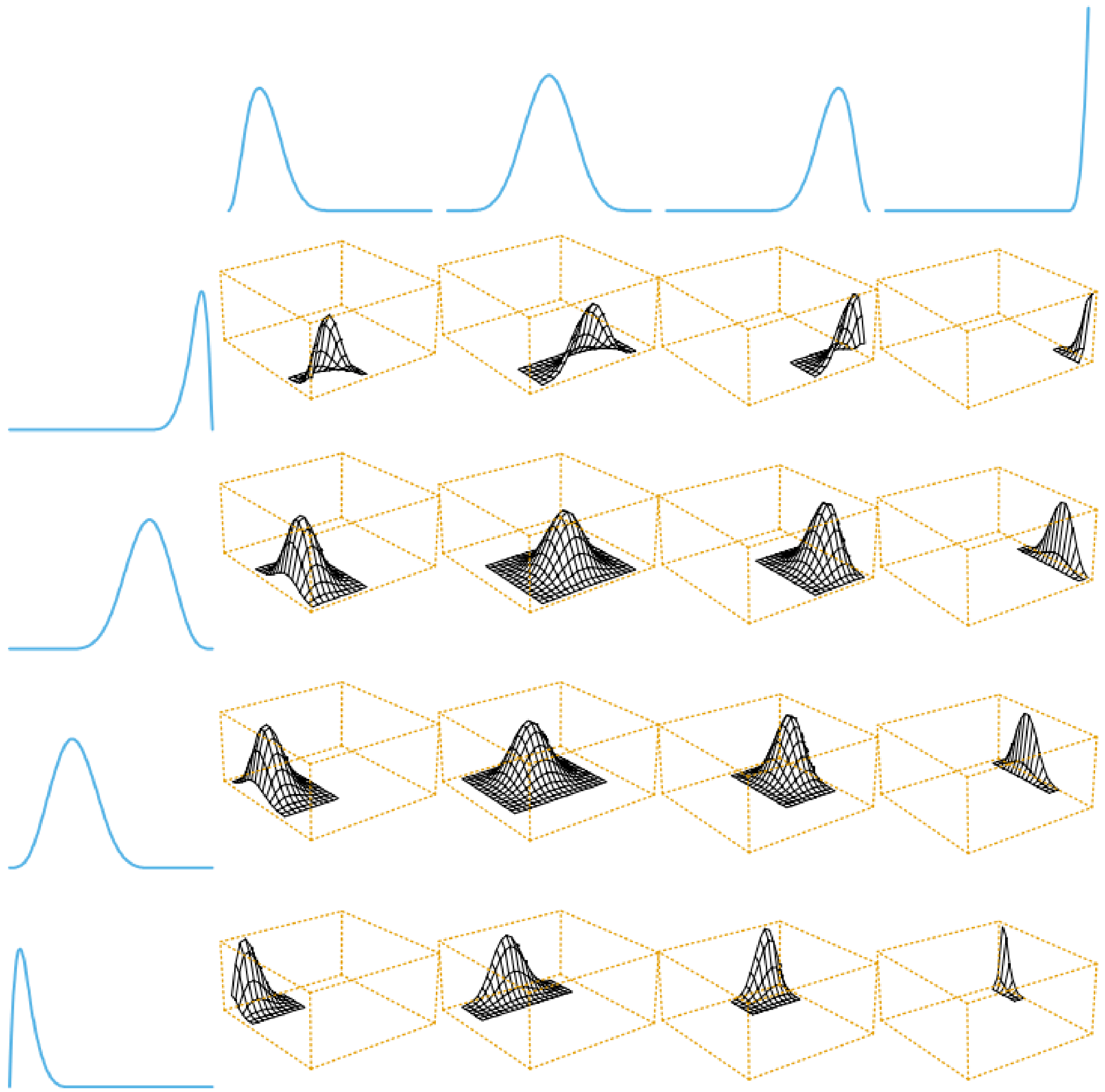
1. 座標X_1 の関数を表すM_1個の基底$h_1 j(X_j) \quad (j = 1, \dots, M_1)$
2. 座標X_2 の関数を表すM_2個の基底$h_2 k(X_k) \quad (k = 1, \dots, M_2)$

これらによって定義される$M_1 \times M_2$次元の**テンソル積基底**を導入する。
これは、2次関数を表現するのに使える。

$$g_{jk}(X) = h_{1j}(X_1)h_{2k}(X_2) \quad (j = 1, \dots, M_1)(k = 1, \dots, M_2)$$

Bスプラインを用いたテンソル積基底で、多次元スプラインも示せる。
係数は最小2乗法で求めており、MARSに近い挙動を取る。
しかし、次元数が増えると**テンソル積基底は指数関数的に増え**、次元の呪いが生じてしまう。

ロジスティック回帰による当てはめも、テンソル積基底によるスプラインを示せる。
決定境界において**柔軟性**があるが、その他の部分では、**誤分類**してしまいやすい。

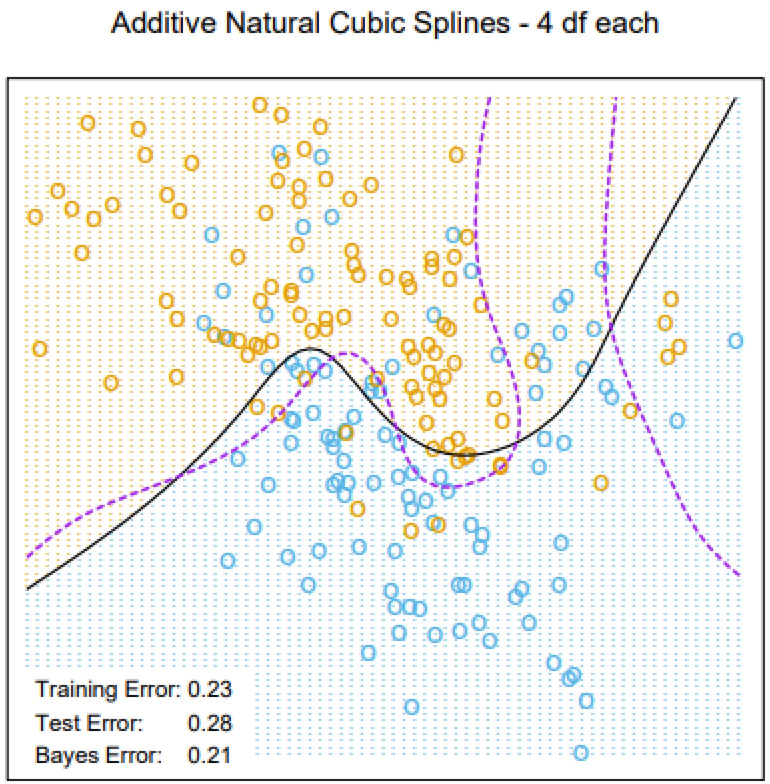


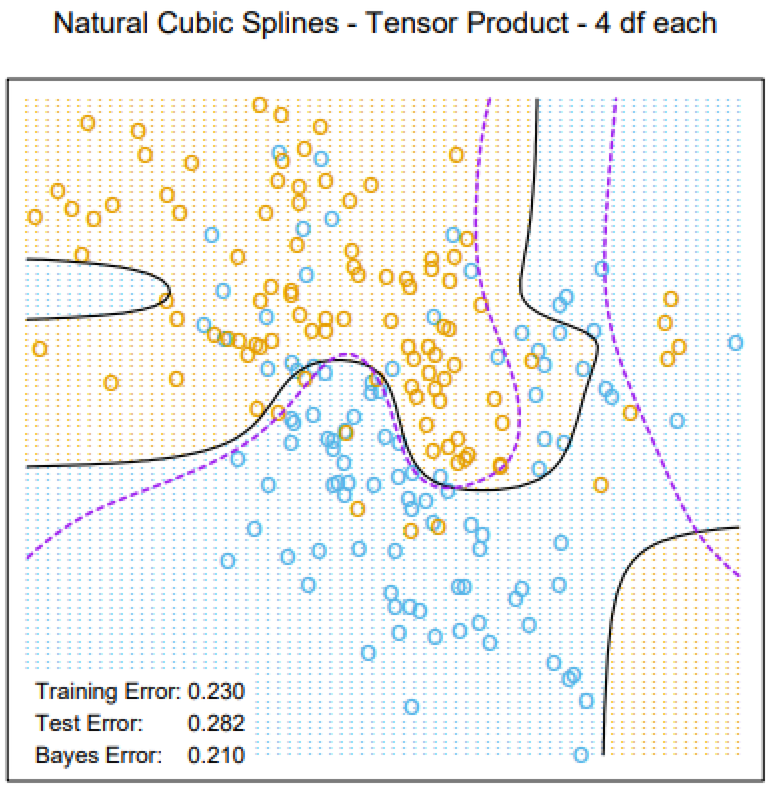
左図はBスプラインで求めた**テンソル基底**である。
黄線部の各2次元関数は、左と上の対応する1次元関数の**テンソル積**である。

テンソル積 ... 既知のベクトル空間から**ベクトル空間を作る**こと。

以下の図は、加法的基底(左)とテンソル積基底(右)の違いを示した図である。

応答はロジスティック回帰$logit[Pr(T|x)] = h(x)^T\theta$、決定境界は$h(x)^T\hat{\theta} = 0$である





一般化平滑化スプラインも高次元に**一般化**できる。

$x_i \in R^d$である組y_i, x_iが与えられた時、d次元回帰関数$f(x)$を求める。

$$\min_f \sum_{i_1}^{N} \{y_i - f(x_i)\}^2 + \lambda J[f] \tag{5.37}$$

Jは関数fを安定させるための**適切な罰則関数**である。

$$J[f] = \int \int_{R^2} \left[\left(\frac{\vartheta^2 f(x)}{\vartheta x_1^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\vartheta^2 f(x)}{\vartheta x_1 \vartheta x_2} \right)^2 + \left(\frac{\vartheta^2 f(x)}{\vartheta x_2^2} \right)^2 \right] dx_1 dx_2 \tag{5.38}$$

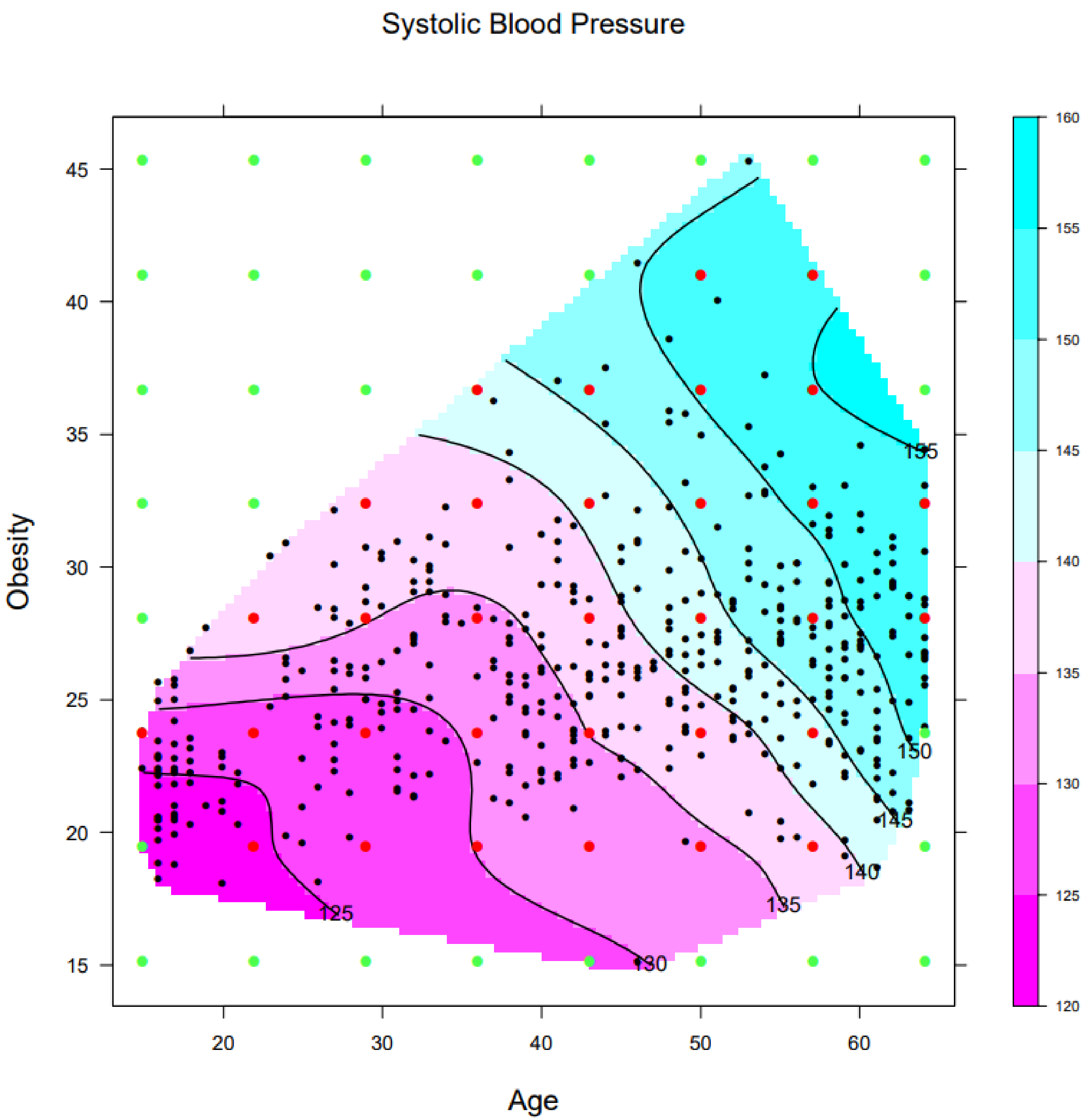
この罰則による式の最適化は、**薄板スプライン (Thin-plate Spline)** の名前で知られ、以下の特徴がある。

1. 滑らかな2次元の表面が得られる。
2. 式(5.37)のλに関して、以下の規則がある。
   2.1. $\lambda \to 0$の時、解は**補完関数**に近づく。(全てのデータ点を通る)
   2.2. $\lambda \to \infty$の時、解は**最小2乗平面**に近づく。 (d次元空間中の平面/超平面)
   2.3. その他のλに関しては、 係数が一般化リッジ回帰で表される基底関数の線型展開として表される。
   ただし、**動径基底関数(radial basis function)** $h_j(x) = \|x - x_j\|^2 \log \|x - x_j\|$

$$f(x) = \beta_0 + \beta^T x + \sum_{j=1}^{N} \alpha_j h_j(x) \tag{5.39}$$

より一般的で**適切なJ**を選べば、薄板スプラインは任意の次元dへと**一般化**できる。
しかし、**計算量は$O(N^3)$と膨大**になる。
$\rightarrow$ 実用上では、領域を覆う接点の格子を用いれば基本問題ない。
K接点$(K < N)$を元にすると計算量は$O(NK^2 + K^3)$まで減らせる。

また、$f \in R^d$は任意の数の基底関数の集合による展開として表現できる。
そのため、式(5.38)のように**正則化**が可能であり、複雑さを調整できる。



左図は薄板スプラインを**心臓病のリスク要因**に当てはめたものである。
等高線図を平面で表している。
入力の特徴の位置に加えて、**当てはめに用いた接点**も表示している。 ただし、外側の緑の接点は、**利用されていない**。

加法的スプラインモデルは、多次元スプラインを**制限**したクラスである。
座標X_d の関数f_dが存在し、以下の式が成り立つ。

$$f(X) = \alpha + \sum_{j=1}^{d} f_j(X_j)$$

また、それぞれのf_jが**1変量スプラインであることを保証する罰則**$J[f]$が存在し、以下の通りである。

$$\begin{aligned} J[f] &= J(f_1 + f_2 + \ldots + f_d) \\ &= \sum_{j=1}^{d} \int f_j''(t_j)^2 dt_j \end{aligned} \tag{5.40}$$

この際、各要素は**所望の次元**を持つスプラインであり、多数の**選択の余地**がある。

1. 相互作用の**最大次数**
2. どの項を含むべきか
3. その表現を用いるべきか
    3.1. **比較的少数**の座標ごとの基底関数と、相互作用のためのテンソル積
    3.2. **全基底**を用いた展開に、各項への適切な**正則化**を加えたもの

参考文献

[1] 一般化加法モデル（GAM）について考える - rmizutaの日記 (参照:2025/06/02)
https://rmizutaa.hatenablog.com/entry/2019/03/23/201720

[2] テンソル積 - Wikipedia (参照:2025/06/04)
https://ja.wikipedia.org/wiki/テンソル積

[3] Pythonでやってみた(Engineering)：方程式の数値解法／ニュートン・ラフソン法｜KIYO (参照:2025/06/03)
https://note.com/kiyo_ai_note/n/n197ec395055a

[4] 補間関数と予測関数について (参照:2025/06/04)
https://support.ptc.com/help/mathcad/r10.0/ja/index.html#page/PTC_Mathcad_Help/about_interpolation_and_prediction_functions.html

[5] 点群にフィットする平面を最小二乗法で求める方法 - 理数アラカルト (参照:2025/06/04)
https://risalc.info/src/fitting-plane-least-squared.html