함수추정 및 실습 HW1

김보창

Q1

1-(a)

m<n일때, periodic boundary를 사용한 moving average를 이용하여 smooth 하는 코드는 다음과 같다.

```
move_avg_periodic <- function(y, m){
    n <- length(y)
    y_right <- y[1:m] # using periodic boundary
    y_left <- y[(n-m+1):n] # using periodic boundary
    y_extend <- c(y_left, y , y_right)

    ey <- rep(0, length = n)

    for(i in 1:n){
        ey[i] <- mean(y_extend[i:(i + 2 * m)])
    }

    return(ey)
}
```

y_right와 y_left에 periodic boundary를 이용하여 m만큼의 길이를 확장한뒤,

y에 y_left와 y_right를 붙여 y_extend로 확장하고 moving average방법을 사용하여

y의 추정값인 ey를 구하고 리턴하게 된다.

1-(b)

m<n일때, periodic boundary를 사용한 binomial filter를 이용하여, smooth 하는 코드는 다음과 같다.

```
binomial_periodic <- function(y, m){
    n <- length(y)
    half_m <- m/2

    y_right <- y[1:half_m] # using periodic boundary
    y_left <- y[(n-half_m+1):n] # using periodic boundary
    y_extend <- c(y_left, y , y_right)

    w <- matrix(0, ncol = n + m, nrow = n + m)

    imat <- row(w)
    jmat <- col(w)

    check <- (0 <= (half_m + imat - jmat)) & ((half_m + imat - jmat) <= m)

    w[check] <- exp(lgamma(m + 1) -
                    lgamma(half_m + imat[check] - jmat[check] + 1) -
                    lgamma(half_m - imat[check] + jmat[check] + 1) -
                    m * logb(2))
    # calculate choose(m,0.5m + i - j)/2^m for valid location.

    ey <- w %*% y_extend
    ey <- as.vector(ey[(half_m + 1) : (n + half_m)]) # use valid part for binomial filter.

    return(ey)
}
```

y_right와 y_left를 이용하여 periodic boundary를 사용하여 0.5m만큼의 길이를 확장한 뒤, y에 y_right와 y_left를 붙여 y_extend로 확장한다.

그 후, w라는 matrix를 도입해서, 행렬곱을 이용해 y_extend에 w곱을 하는것으로 binomial filter로 smooth하는 효과를 줄 수 있도록, w를 적절히 구성한다.

w에서 $0 <= 0.5m + i - j, 0.5m + i - j <= m$일때만 binomial filter에 해당하는 값을 가져야만 하므로, True, False로만 이루어진 check라는 matrix를 만들어서 check가 True인 곳에서의 W의 성분을 binomial filter에 맞는 값을 가지게 하였다.

이를 구현하기 위해 $\Gamma(n+1) = n!$임을 이용, exp에 loggamma(lgamma)함수를 이용하여 \frac{{m \choose 0.5m + i - j}}{2^m} 에 해당하는 값을

w에 집어넣게 하였다.

그 후, w와 y를 곱해 ey라는 벡터를 뽑아내고, ey에서 우리가 필요한 부분은 중간부분이므로

이 부분을 적절히 잘라 리턴하게 하였다.

1-(c)

위 함수들을 이용하여 다음 값들을 smooth 해보자.

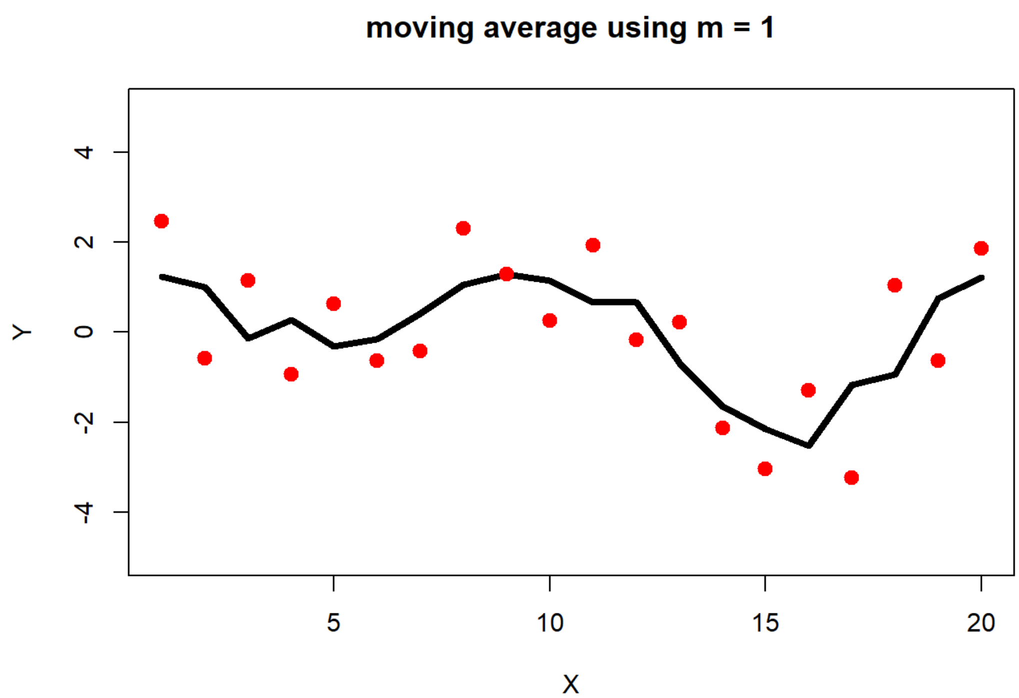
```
ploting_func <- function(ey, y, title = ""){
    x <- seq(from = 1, by = 1, length = length(ey))
    plot(x, ey, type = "n", ylim = c(-5,5), xlab = "X", ylab = "Y", main = title)
    lines(x, ey, lwd = 4)
    points(x, y, pch = 19, lwd = 3, col = 'red')
}

par(mfrow = c(1,1), mai = c(1.5, 1.5, 0.5, 0.5), oma = c(1,1,1,1))

y <- c(2.46, -0.59, 1.14, -0.94, 0.62, -0.63, -0.43, 2.30, 1.29, 0.25, 1.92, -0.17, 0.22, -2.13, -3.03, -1.2
9, -3.24, 1.04, -0.64, 1.85)

m_small = 1
m_medium = 4
m_large = 7


ey_moving_small <- move_avg_periodic(y, m_small)
ey_moving_medium <- move_avg_periodic(y, m_medium)
ey_moving_large <- move_avg_periodic(y, m_large)

ey_binomial_small <- binomial_periodic(y, 2*m_small)
ey_binomial_medium <- binomial_periodic(y, 2*m_medium)
ey_binomial_large <- binomial_periodic(y, 2*m_large)
```

ploting_func라는 함수를 새로 정의하여 그래프를 그리는 과정을 자동화 하였다.

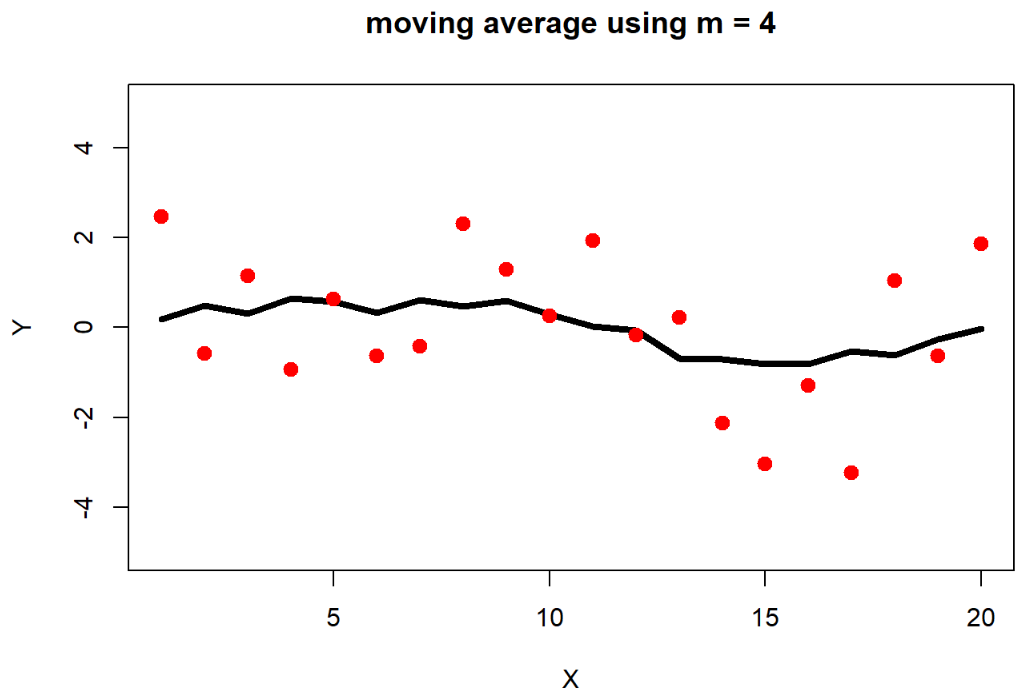
각각의 smooting 한 값을 이용하여, 기존의 y data와 함께 그려보자.

먼저 moving average를 이용한 방법이다.

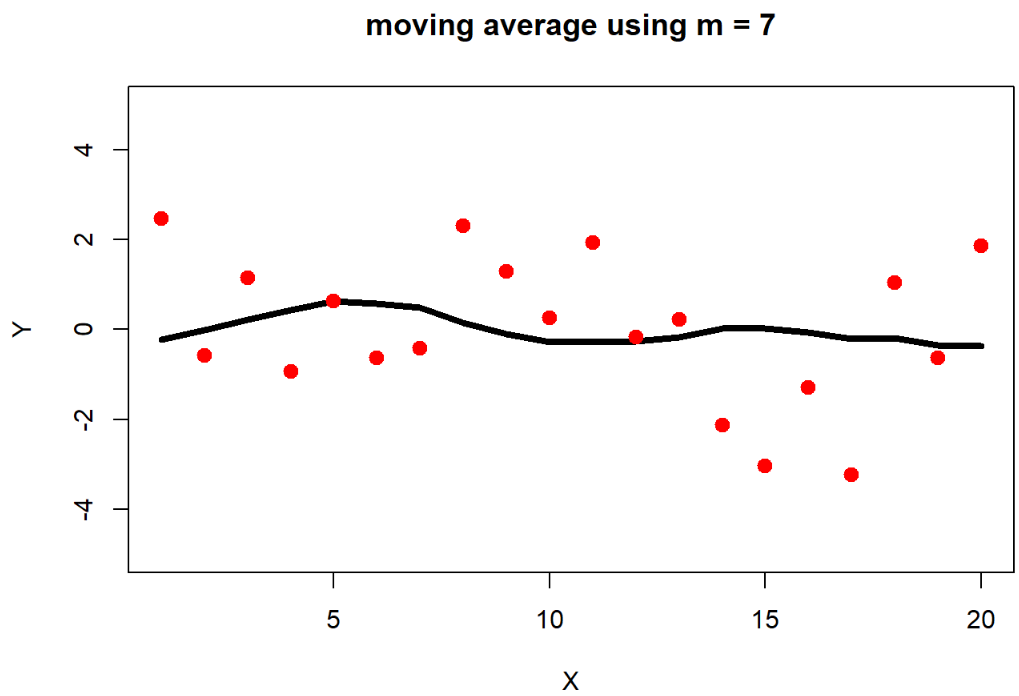
```
ploting_func(ey_moving_small, y, "moving average using m = 1")
```




```
ploting_func(ey_moving_medium, y, "moving average using m = 4")
```




```
ploting_func(ey_moving_large, y, "moving average using m = 7")
```



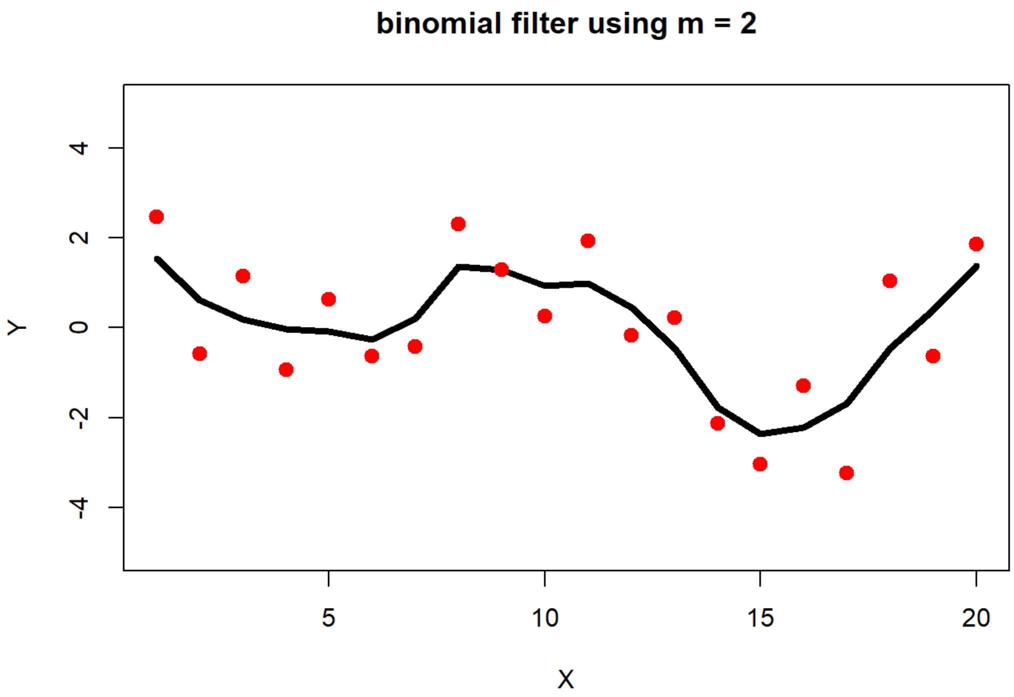
m이 커질수록,그래프의 smoothness는 증가하지만 fitidity는 감소하는것을 알 수 있다.

즉, m이 작으면 원래 데이터인 y에 더 민감하게 반응하여 fit은 잘되지만, smoothness가 떨어지고,

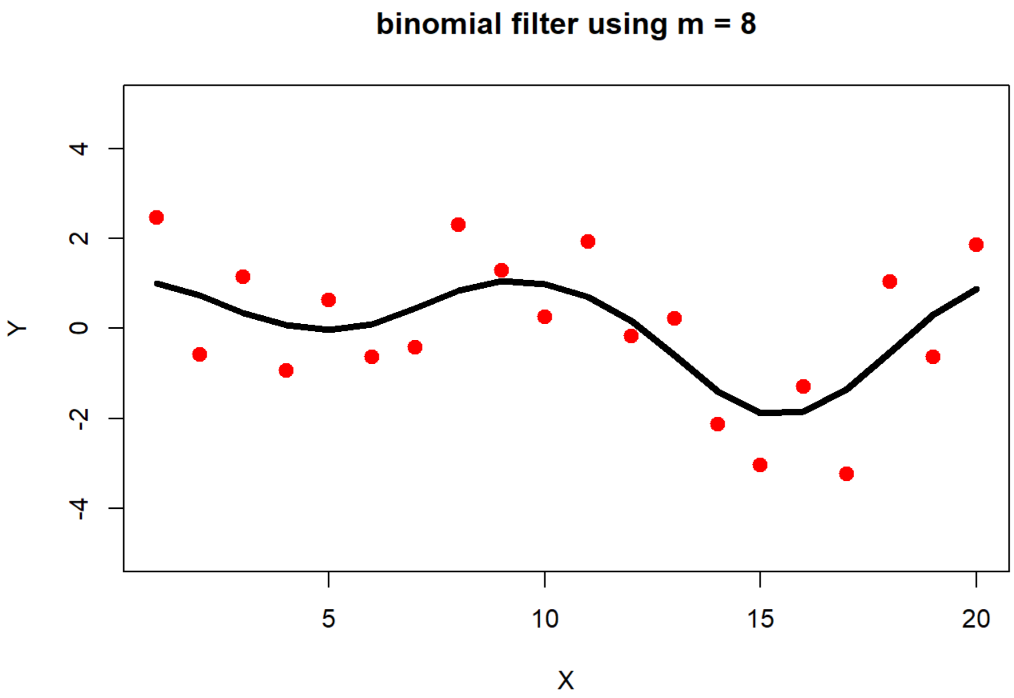
m이 크면 반대로 fit은 잘 되지 않지만, smoothness가 증가하는것을 알 수 있었다.

binomial filter를 이용한 방법으로도 plot해보자.

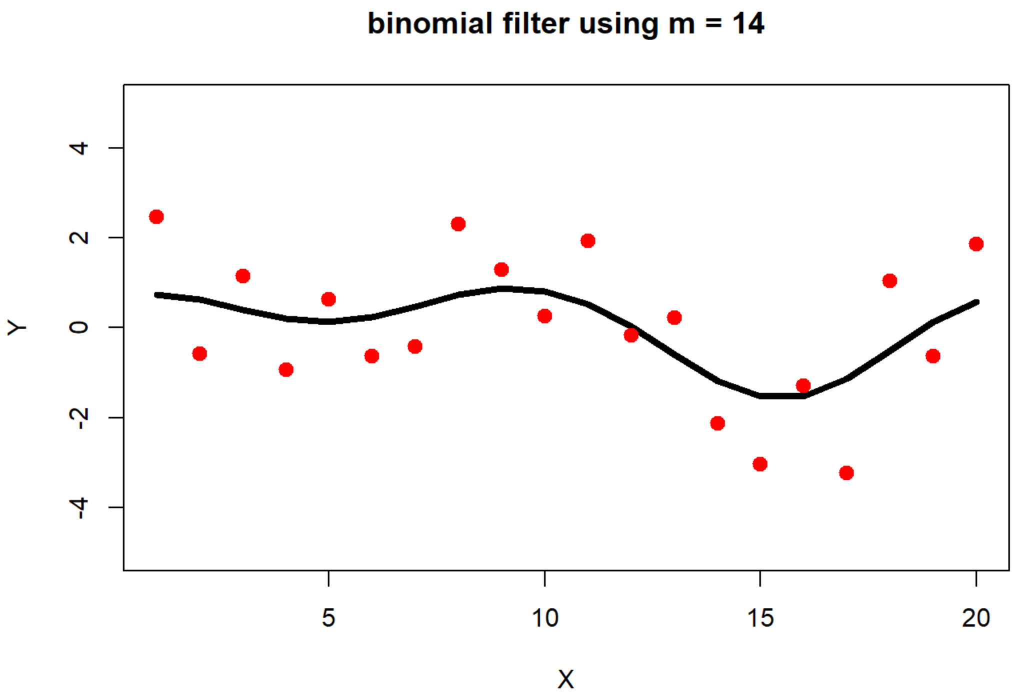
```
ploting_func(ey_binomial_small, y, "binomial filter using m = 2")
```




```
ploting_func(ey_binomial_medium, y, "binomial filter using m = 8")
```




```
ploting_func(ey_binomial_large, y, "binomial filter using m = 14")
```



역시, moving average를 이용한 방법과 마찬가지로, m이 커질수록 smoothness는 증가하지만 fitidity가 감소하는것을 알 수 있었다.

moving average를 이용한 방법과의 차이는, binomial filter 방법은 moving average를 이용한 방법에 비해 ey를 계산할때 ey에 해당하는 x와 가까운 y값을 더 많이 반영하기 때문에, moving average에 비해 fitidity가 더 높은편임을 알 수 있다.

즉, 원래 데이터의 경향성을 더 많이 따라가는 경향이 있다.

1-(d)

위 함수들을 이용하여 다음 값들을 smooth 해보자.

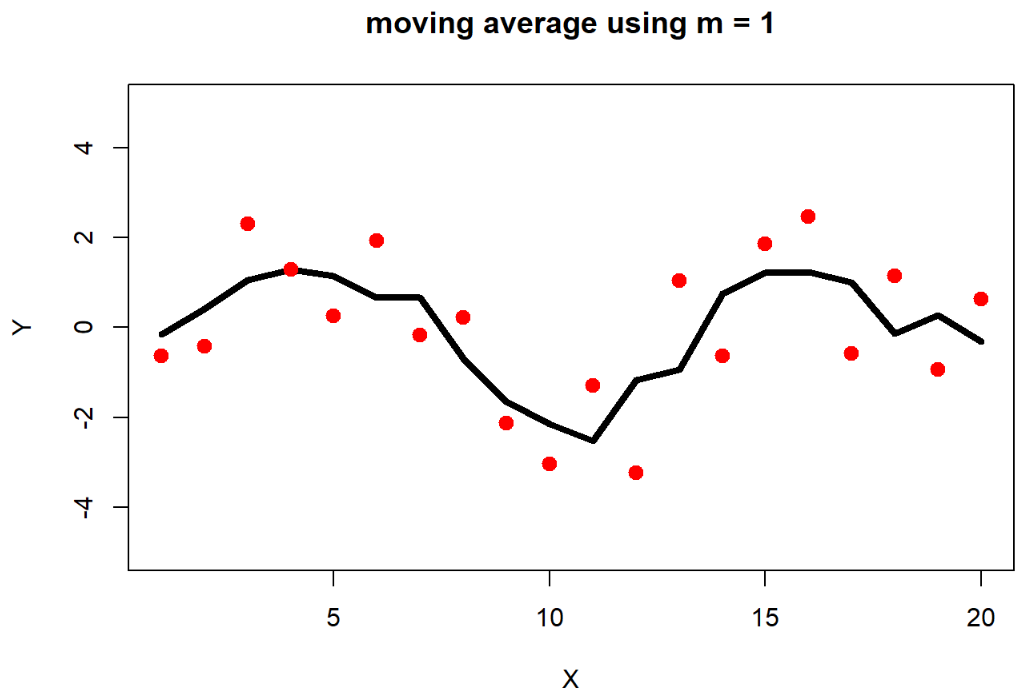
```
new_y <- c(-0.63, -0.43, 2.30, 1.29, 0.25, 1.92, -0.17, 0.22, -2.13, -3.03, -1.29, -3.24, 1.04, -0.64, 1.85,
2.46, -0.59, 1.14, -0.94, 0.62)

m_small = 1
m_medium = 4
m_large = 7


new_ey_moving_small <- move_avg_periodic(new_y, m_small)
new_ey_moving_medium <- move_avg_periodic(new_y, m_medium)
new_ey_moving_large <- move_avg_periodic(new_y, m_large)

new_ey_binomial_small <- binomial_periodic(new_y, 2*m_small)
new_ey_binomial_medium <- binomial_periodic(new_y, 2*m_medium)
new_ey_binomial_large <- binomial_periodic(new_y, 2*m_large)
```

역시 위와같이, 각각 m값에 따라 moving average와 binomial filter를 이용한 그래프를 그릴것이다.

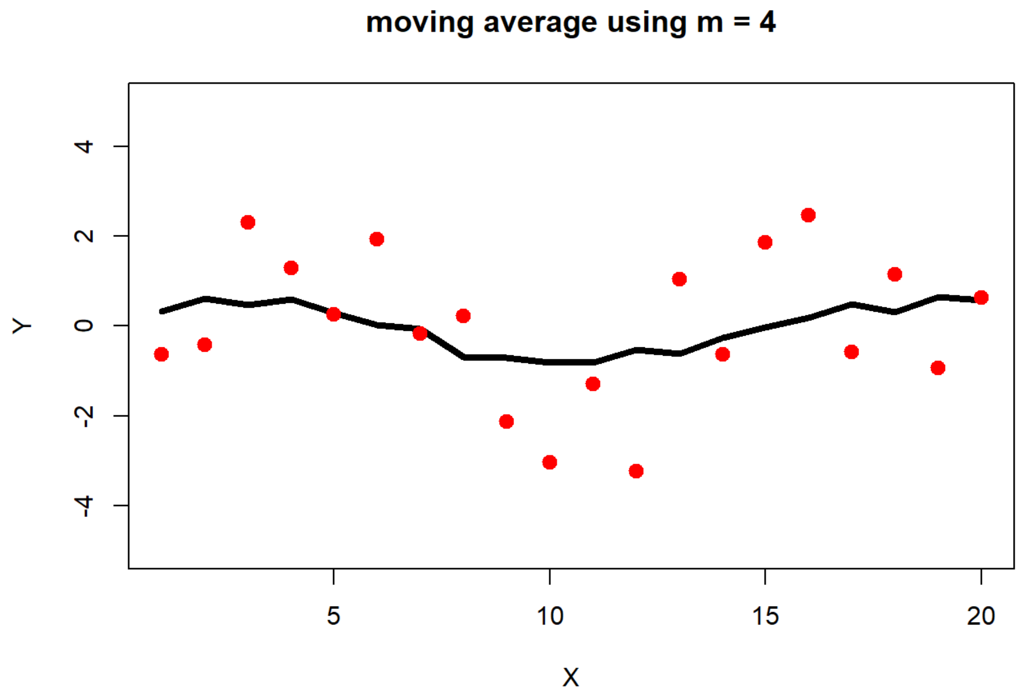
여기서 특이점으로는, (d)에서의 y값은 (c)에서의 y값을 단순히 shift시킨것에 불과하다는 사실이다.

먼저 moving average에 의한 그래프를 그려보았다.

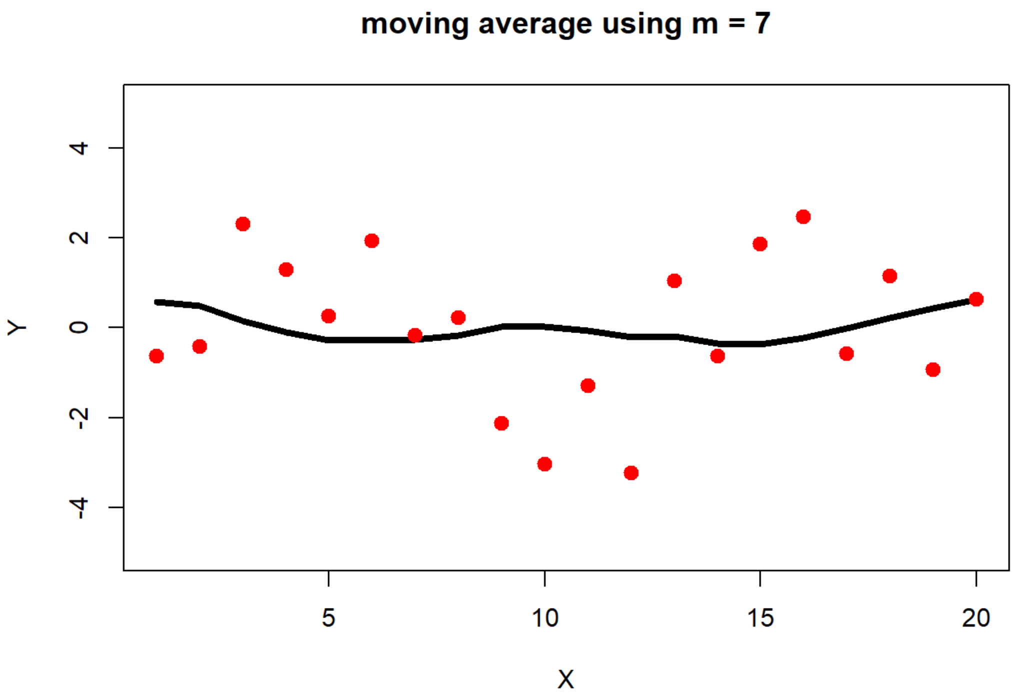
```
ploting_func(new_ey_moving_small, new_y, "moving average using m = 1")
```




```
ploting_func(new_ey_moving_medium, new_y, "moving average using m = 4")
```




```
ploting_func(new_ey_moving_large, new_y, "moving average using m = 7")
```



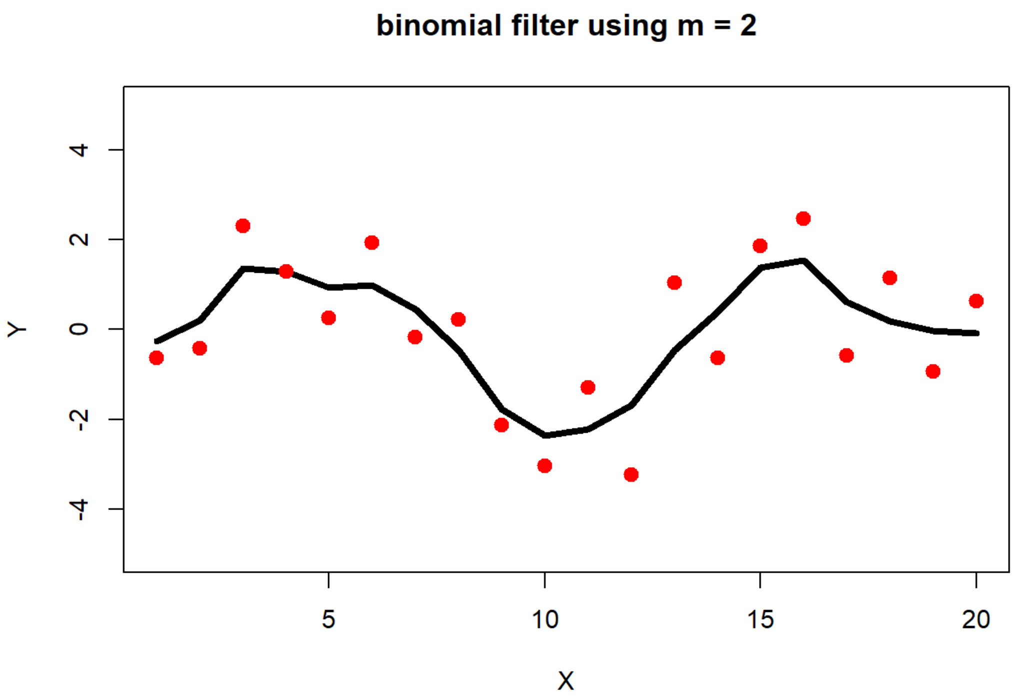
그래프를 잘 살펴보면, 1-(c)에서 그린 그래프들을 단순히 shift 시킨것에 불과함을 알 수 있다.

이는 사실 당연한것인데, periodic boundary를 사용했기 때문에 moving average 방법을 사용했을때,

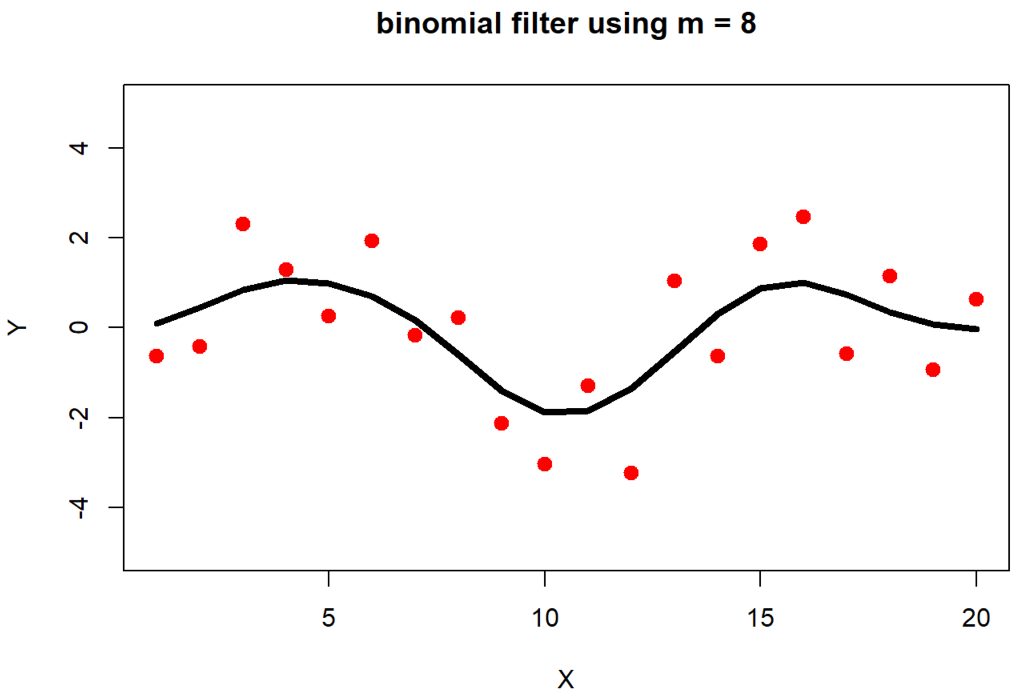
각 x값에 따른 ey가 계산되는 방법은, 각 x에 해당하는 위치만 다르지 동일한 값들을 사용하게 된다.

따라서 periodic shift가 estimate의 essential behaviour에 영향을 주지 않음을 알 수 있다.

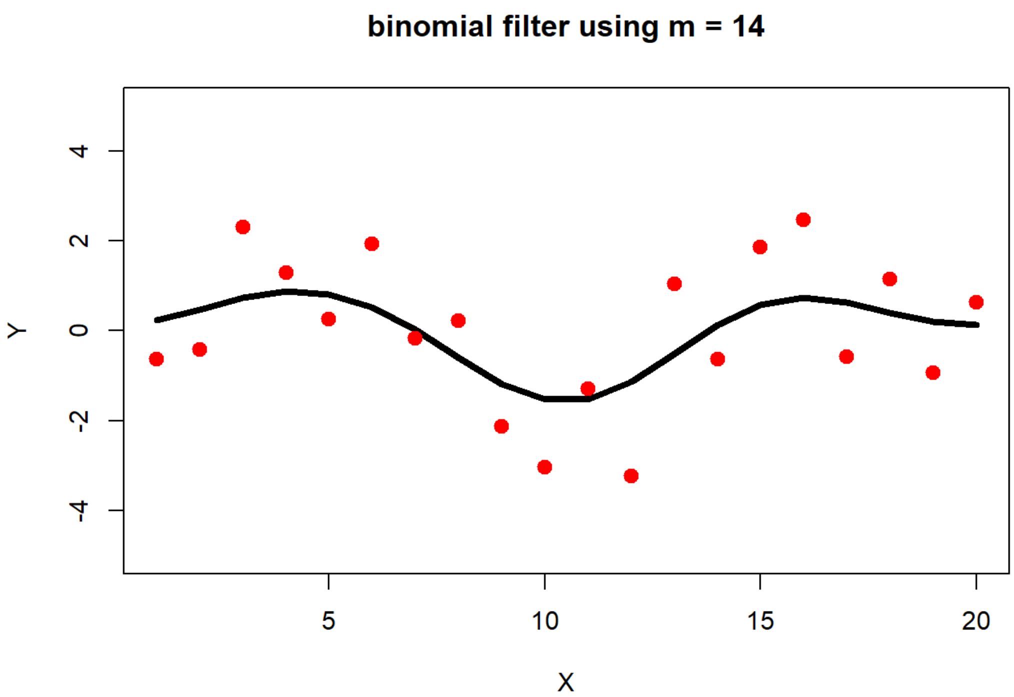
```
ploting_func(new_ey_binomial_small, new_y, "binomial filter using m = 2")
```




```
ploting_func(new_ey_binomial_medium, new_y, "binomial filter using m = 8")
```




```
ploting_func(new_ey_binomial_large, new_y, "binomial filter using m = 14")
```



binomial filter에 의한 방법도 마찬가지로, 1-(c)에서 그린 그래프들을 단순히 shift 시킨것에 불과하는데, 이 역시 periodic boundary를 사용하기 때문에, binomial filter에 의하면 ey를 계산할때 주변 y값들을 가까우면 가중치를 많이주어서, 멀면 가중치를 적게 주어 반영하게 되는데, 단순히 y값들을 shift 시켰고, 거기에 periodic boundary를 사용했기 때문에 역시 각 x값에 따른 ey가 계산될때는 x의 위치만 다르지, 결국 동일한 값들을 사용하게 되어 단순히 그래프가 shift되기만 하는 것이다.

실제로 계산된 값을 비교해보면

```
ey_moving_medium
```

```
##  [1]  0.18888889  0.47888889  0.31555556  0.64222222  0.58000000
##  [6]  0.33444444  0.61333333  0.46777778  0.59666667  0.29111111
## [11]  0.02444444 -0.07111111 -0.68666667 -0.71444444 -0.81333333
## [16] -0.82111111 -0.52888889 -0.61888889 -0.25555556 -0.02333333
```

```
new_ey_moving_medium
```

```
##  [1]  0.33444444  0.61333333  0.46777778  0.59666667  0.29111111
##  [6]  0.02444444 -0.07111111 -0.68666667 -0.71444444 -0.81333333
## [11] -0.82111111 -0.52888889 -0.61888889 -0.25555556 -0.02333333
## [16]  0.18888889  0.47888889  0.31555556  0.64222222  0.58000000
```

```
ey_binomial_medium
```

```
##  [1]  0.99585938  0.72667969  0.34785156  0.07417969 -0.02816406
##  [6]  0.09265625  0.44703125  0.85050781  1.05179688  0.98617188
## [11]  0.69945313  0.16558594 -0.60449219 -1.39300781 -1.87476563
## [16] -1.85007813 -1.34031250 -0.53156250  0.30574219  0.87886719
```

```
new_ey_binomial_medium
```

```
##  [1]  0.09265625  0.44703125  0.85050781  1.05179688  0.98617188
##  [6]  0.69945313  0.16558594 -0.60449219 -1.39300781 -1.87476563
## [11] -1.85007813 -1.34031250 -0.53156250  0.30574219  0.87886719
## [16]  0.99585938  0.72667969  0.34785156  0.07417969 -0.02816406
```

두 방법 모두 그저 값들이 shift되기만 했음을 알 수 있다.

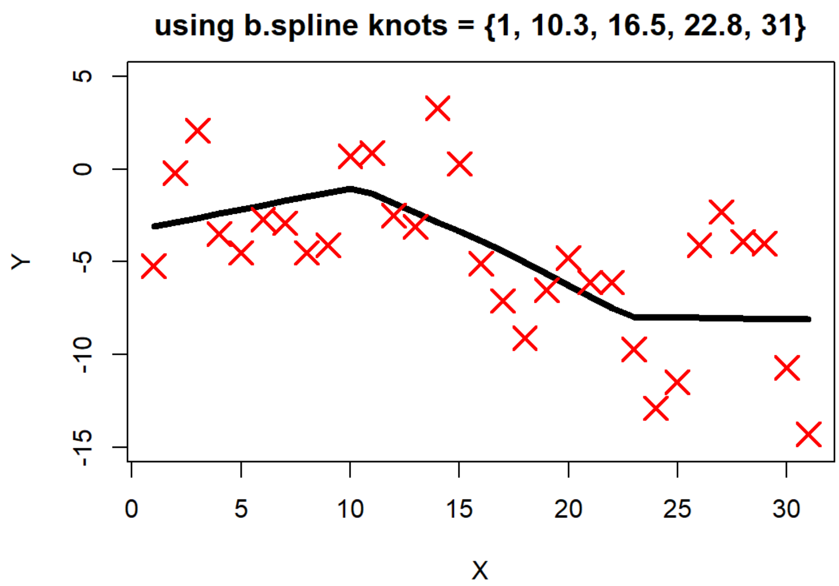
즉, periodic shift가 estimate의 essential behaviour에 영향을 주지 않음을 알 수 있다.

Q2

2-(a)

(F)의 코드를 적당히 고쳐서 {1, 10.3, 16.5, 22.8, 31}의 knot를 사용하게 하면, 다음과 같다.

```
library(splines)

nd <- 31
xx <- seq(from = 1, by = 1, length = nd)
yy <- scan("wak2.csv")

data1 <- data.frame(x = xx, y = yy)

fit.lm <- lm(y ~ bs(x, knots = c(10.3, 16.5, 22.8), degree = 1), data = data1)

ey <- fitted.values(fit.lm)

par(mfrow = c(1,1), mai = c(1.5, 1.5, 0.5, 0.5), oma = c(1,1,1,1))

plot(xx, ey, type = "n", ylim = c(-15,5), xlab = "X", ylab = "Y", main = "using b.spline knots = {1, 10.3, 1
6.5, 22.8, 31}")

lines(xx, ey, lwd = 4)
points(xx, yy, pch = 4, lwd = 2, col = 'red', cex=2)
```



위와같이 구현하면 된다. 이는 F의 코드에서 knots 부분만 수정해준 것으로, boundary에 해당하는 1, 31의 값은 집어넣지 않아도 된다.

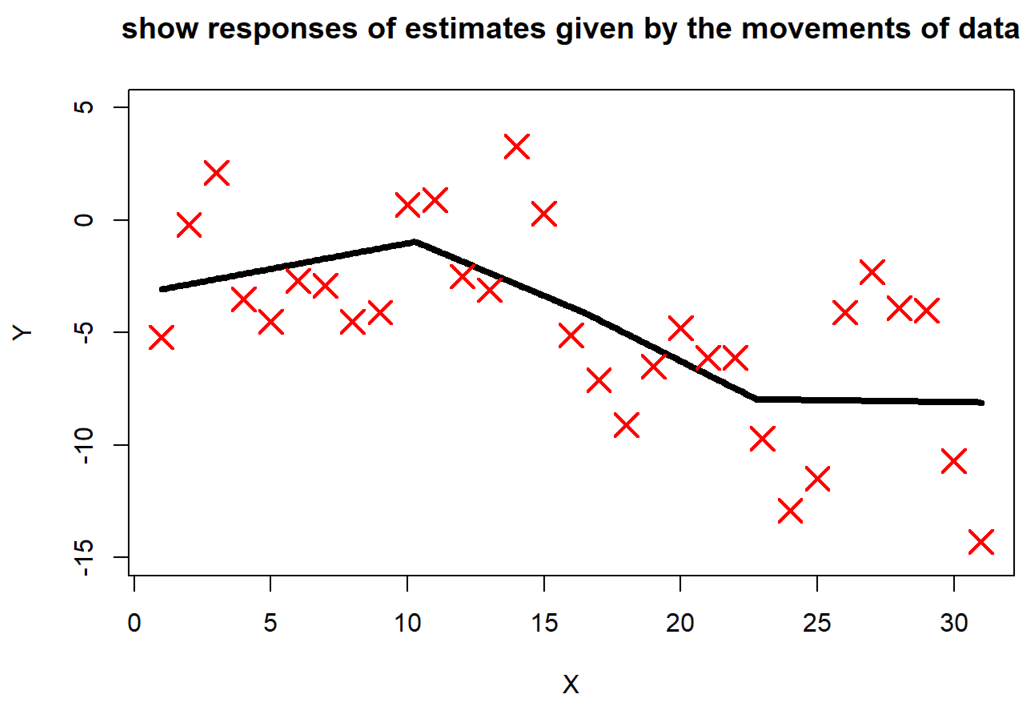
그래프를 보면 해당 값들을 knot로 삼았음을 알 수 있다.

2-(b)

data의 movement에 따라 estimate들의 response를 살펴보기 위해, 위에서 구한 fit.lm 모델을 이용하여 새로운 데이터에 대한 prediction들이 어떻게 되는지를 알아볼 것이다.

1~31까지, 0.1 단위로 x값을 생성하여, 위 모델을 통해 각 x에서의 y의 추정값이 어떻게 되는지를 알아볼 것이다.

```
ex <- seq(from = 1, by = 0.1, to = 31)

data2 <- data.frame(x = ex)
new_ey <- predict(fit.lm, newdata = data2)

plot(ex, new_ey, type = "n", ylim = c(-15,5), xlab = "X", ylab = "Y", main = "show responses of estimates gi
ven by the movements of data")

lines(ex, new_ey, lwd = 4)
points(xx, yy, pch = 4, lwd = 2, col = 'red', cex=2)
```



2-(a)에서 그린 그래프와 비교해보면, 거의 차이가 없음을 알 수 있는데, 이는 우리가 추정한 spline의 차수가 1차로, 선형함수이기 때문에 knot 사이에 있는 값들은 모두 일직선상에 놓이도록 추정되기 때문이다.

이제 hat matrix에 대한 그래프를 그려보자.

hat matrix를 구하기 위해서는, 각각 e_1, e_2, … e_n에 해당하는 벡터를 hat matrix에 집어넣어 나온 결과가 hat matrix의 1,2… n번째 열이 되므로, 즉, x데이터로는 그대로 1~31까지의 데이터를 이용하고, y데이터로 각각 e_1,e_2… e_n을 이용하여 estimate한 값들을 통해 hat matrix를 구할수 있다.

여기서 n=31이므로, 이를 구하는 코드를 짜고, hat matrix를 plot해보자.

```
nd <- 31
xx <- seq(from = 1, by = 1, length = nd)
hat <- matrix(0, ncol = nd, nrow = nd) #31x31 zero matrix

for(i in 1:nd){
    e <- rep(0, nd)
    e[i] <- 1   #make e_i, elementary vector.
    e_data <- data.frame(x = xx, y = e) #make new data
    e_fit.lm <- lm(y ~ bs(x, knots = c(10.3, 16.5, 22.8), degree = 1), data = e_data)

    hat[,i] <- fitted.values(e_fit.lm)
    #get hatmatrix's ith column
}
#get hat, first check if hat is truely hat matrix.
ey
```

```
##         1         2         3         4         5         6         7 
## -3.077400 -2.849121 -2.620843 -2.392564 -2.164286 -1.936007 -1.707728 
##         8         9        10        11        12        13        14 
## -1.479450 -1.251171 -1.022893 -1.311768 -1.822281 -2.332794 -2.843307 
##        15        16        17        18        19        20        21 
## -3.353820 -3.864333 -4.425134 -5.036222 -5.647311 -6.258399 -6.869488 
##        22        23        24        25        26        27        28 
## -7.480576 -7.972770 -7.989386 -8.006002 -8.022618 -8.039234 -8.055850 
##        29        30        31 
## -8.072466 -8.089082 -8.105698
```

```
hat %*% yy
```

```
##             [,1]
##  [1,] -3.077400
##  [2,] -2.849121
##  [3,] -2.620843
##  [4,] -2.392564
##  [5,] -2.164286
##  [6,] -1.936007
##  [7,] -1.707728
##  [8,] -1.479450
##  [9,] -1.251171
## [10,] -1.022893
## [11,] -1.311768
## [12,] -1.822281
## [13,] -2.332794
## [14,] -2.843307
## [15,] -3.353820
## [16,] -3.864333
## [17,] -4.425134
## [18,] -5.036222
## [19,] -5.647311
## [20,] -6.258399
## [21,] -6.869488
## [22,] -7.480576
## [23,] -7.972770
## [24,] -7.989386
## [25,] -8.006002
## [26,] -8.022618
## [27,] -8.039234
## [28,] -8.055850
## [29,] -8.072466
## [30,] -8.089082
## [31,] -8.105698
```

```
max(abs(ey - hat %*% yy))
```

```
## [1] 3.552714e-15
```

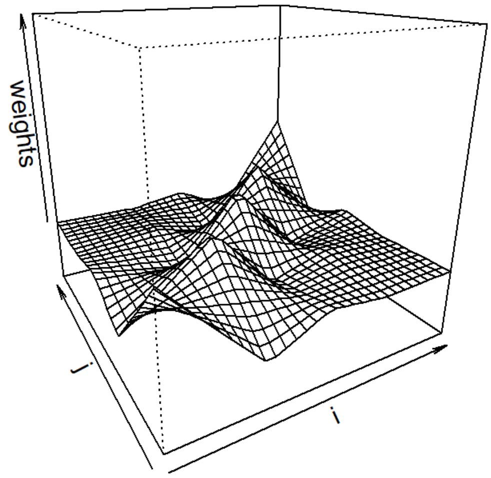
먼저, hat matrix를 구했다. 각 e_i에 해당하는 fitted value를 hat matrix의 ith column으로 만들고, 이 hat matrix가 실제 hat인지 알아보기 위해

2-(a)에서 yy값을 이용해 fit한, fitted value인 ey와, hat과 yy를 곱한 벡터가 같은지를 확인해 보았다.

결과적으로, 두 벡터의 차이가 0벡터이면 같은것으로 판별할 수 있는데, 차이에 해당하는 벡터의 원소들의 절댓값의 최댓값이 3.55*10^{-15}정도로, 0에 매우 가까우므로 hat을 구했음을 알 수 있다.

이제 hat matrix를 plot하면

```
persp(hat, zlim = c(-0.3, 1), xlab = "i", ylab = "j", zlab = "weights", lab = c(3,3,3), theta = -30, phi = 20)
```



위와 같음을 알 수 있다.

이 hat matrix의 특징으로는, 대각선 원소들은 상대적으로 큰 양의 값을 가지고, 대각선 근처의 원소들중 음수인 값들이 있어, 데이터가 변화할때 예상하지 못한 방향으로 그래프가 달라질 수 있는 가능성이 있다.

즉, oscilation 이 존재하는 hat matrix임이 보여진다.

Q3

3-(a)

(G)의 코드를 약간 수정해서, 먼저 llin에서, 각 x값에서 fit하는데 사용한 coefficient들을 추정값과 같이 리턴하도록 만들고,

이를 이용하여 각 x값에서 어떻게 y값을 추정하는지를 알 수 있는 그래프를 만들었다.

즉, 각 x값에서 x에 해당하는 coefficient를 이용해서 접선을 그리도록 하였다.

이때, 너무 많은 x값에서 접선을 출력하면 보기가 힘드므로,

5의 간격을 두고 출력하도록 하였다.

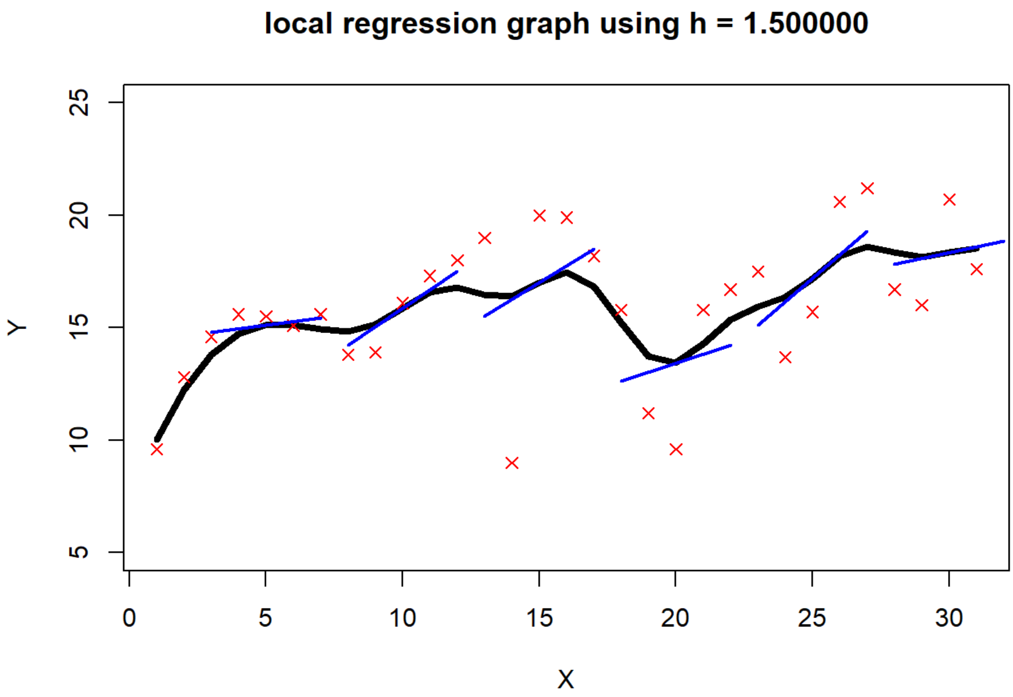
```r
lline_modify <- function(yy, hh)
{
    llin_coef <- function(ex1, xdata, ydata, band)
    {
        wts <- exp((-0.5 * (ex1 - xdata)^2/band^2))

        data1 <- data.frame(x = xdata, y = ydata, www = wts)

        fit.lm <- lm(y ~ x, data = data1, weights = www)

        estimate <- fit.lm$coef[1] + fit.lm$coef[2] * ex1

        retval <- c(fit.lm$coef, estimate)
        names(retval) = c("(Intercept)", "x", "estimated value")

        return(retval)
    }

    nd <- length(yy)
    xx <- seq(from = 1, by = 1, length = nd)

    xxmat <- matrix(xx, ncol = 1)

    coef_at_x <- apply(xxmat, 1, llin_coef, xdata = xx, ydata = yy, band = hh)
    ey <- as.vector(coef_at_x[3,])
    coefs <- coef_at_x[1:2,]

    plot(xx, ey, type = "n", ylim = c(5,25), xlab = "X", ylab = "Y", main = sprintf("local regression graph
using h = %f", hh))
    lines(xx, ey, lwd=4)
    points(xx, yy, pch = 4, col = "red")

    for(i in seq(from = 5, by = 5, to = nd)){
        x = c(i-2, i+2)
        y = coefs[1,i] + coefs[2,i]*x
        lines(x = x, y = y, col = 'blue', lwd = 2)
    }
    # draw tangent line at point

}
```

line을 그릴때, x값에 해당하는 coef를 이용해 x 근방의 점 2개를 찍고, 두 점을 이어주어 tangent line을 출력하도록 하였다.

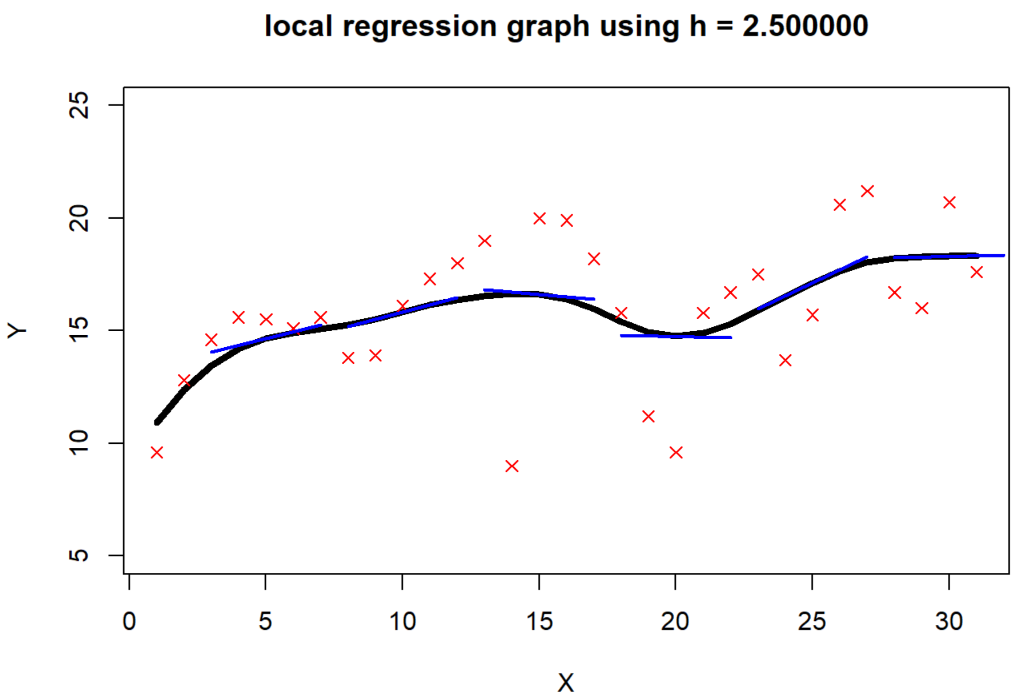
3-(b)

이제, 여러가지 bandwidth값을 이용하여 데이터에 대해 그래프를 그려보자.

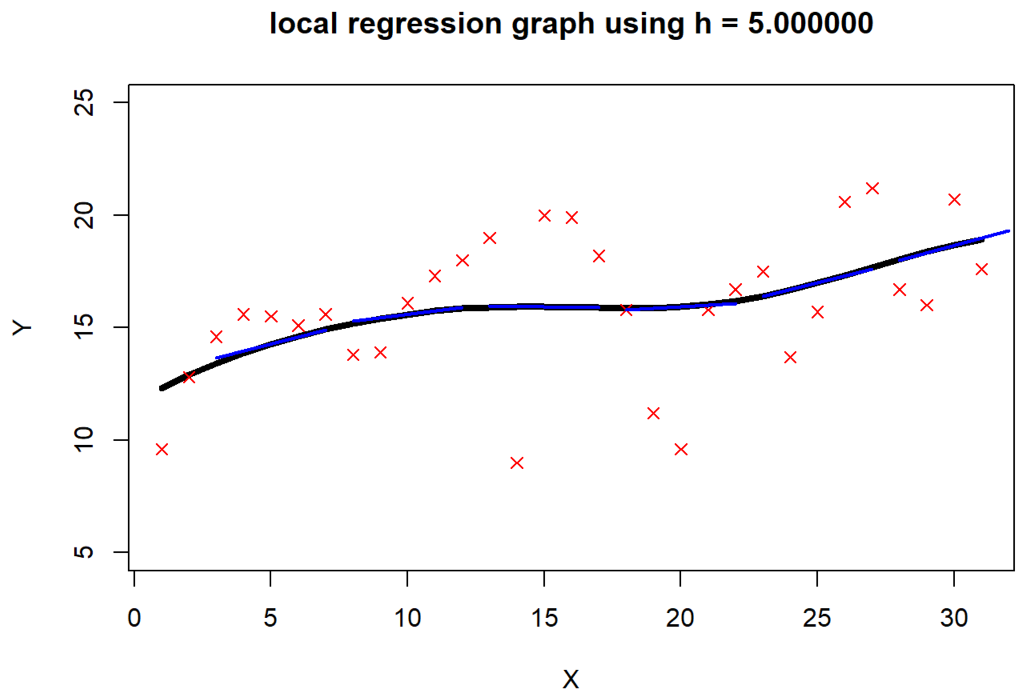
```r
yy <- c(9.6, 12.8, 14.6, 15.6, 15.5, 15.1, 15.6, 13.8, 13.9, 16.1, 17.3, 18, 19, 9, 20, 19.9, 18.2, 15.8, 1
1.2, 9.6, 15.8, 16.7, 17.5, 13.7, 15.7, 20.6, 21.2, 16.7, 16, 20.7, 17.6)
hh <- 1.5
lline_modify(yy,hh)
```




```
hh <- 2.5
lline_modify(yy,hh)
```




```
hh <- 5
lline_modify(yy,hh)
```



bandwidth의 값을 더 크게 할 수록, smoothness가 더 늘어나는것을 볼 수 있다. 이는 각 점에서 local regression을 진행할때 h가 클수록, 고려해야할 주변 점에서의 weight가 커지기 때문이다.

즉, 각 X_j에서의 회귀 계수는 다음과 같이 구해지는데

$argmin_{j, j} = {i=1}^nw{ij}(_j + _jX_i - Y_i) $ w_{ij} = e^{-\frac{1}{2}(\frac{X_i - X_j}{h})^2}가 h가 큰경우가 h가 작은경우보다 X_j에서 떨어져있는 점들에 대해 더 많이 고려해야하므로, smoothness 가 증가함을 알 수 있다.

즉, h가 커질수록 smoothness가 늘어나지만 fitidity가 줄어드는것을 확인할 수 있다.

Q4

4-(a)

섹션 2.7 (H)에 있는 코드는 아래와 같다.

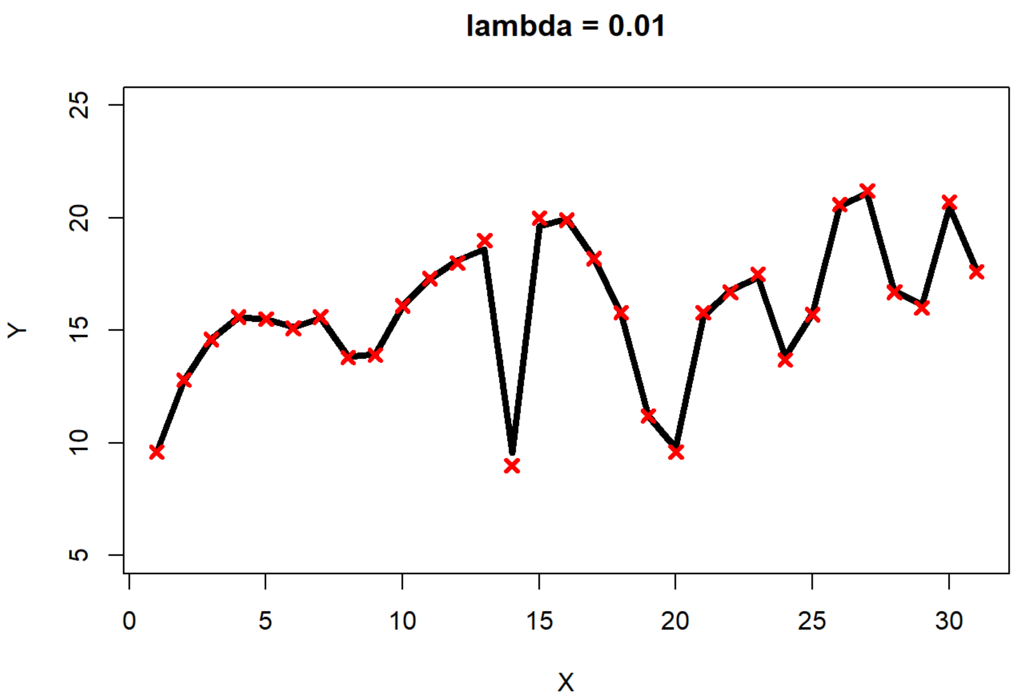
```
smspe <- function(yy, lambda)
{
    nd <- length(yy)

    ss <- c(1, -2, 1, rep(0, nd-3))
    ss <- rbind(ss, c(-2, 5, -4, 1, rep(0, length = nd - 4)))
    for(ii in 1:(nd - 4)){
        ss <- rbind(ss, c(rep(0, ii-1), 1, -4, 6, -4, 1, rep(0, nd - ii -4)))}
    ss <- rbind(ss, c(rep(0, length = nd - 4), 1, -4, 5, -2))
    ss <- rbind(ss, c(rep(0, length = nd - 3), 1, -2, 1))

    ssi <- diag(nd) + lambda*ss

    ey <- solve(ssi, yy) # get ssi^-1*yy
    ey <- as.vector(ey)

    return(ey)
}
```

이는 \hat{y} = (I + \lambda S)^{-1}y 식을 통해 \hat{y}를 구해주는 함수다.

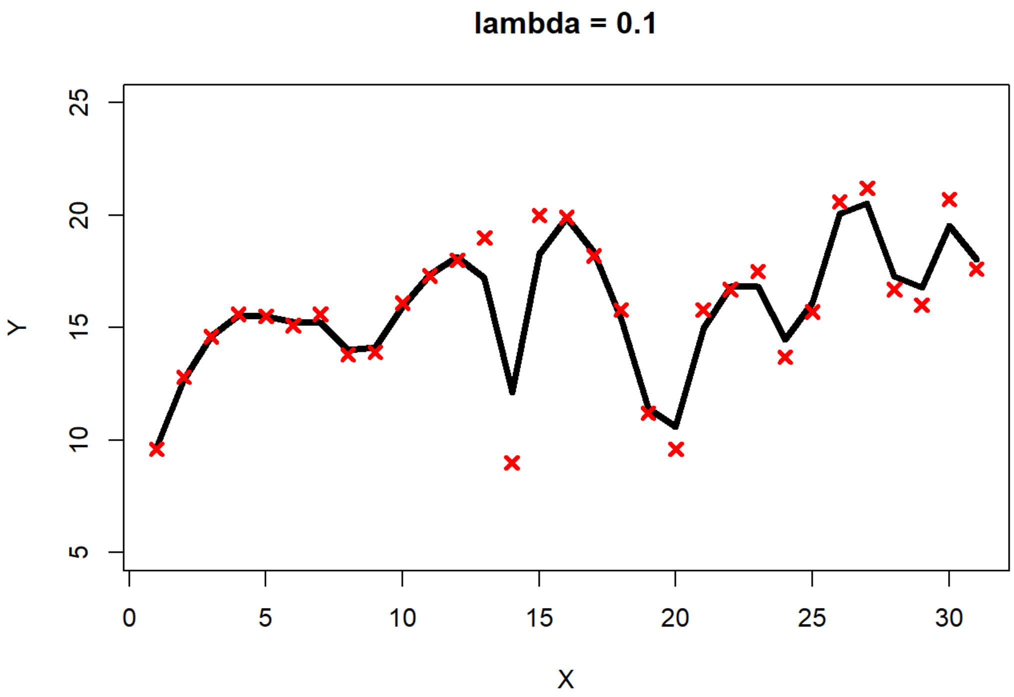
이제, 이를 이용하여 Q.3에 있는 데이터를 다양한 \lambda를 이용하여 smoothing 해보자.

위에서 만든 ploting_func 함수를 조금 바꿔서 다시 이용할것이다.

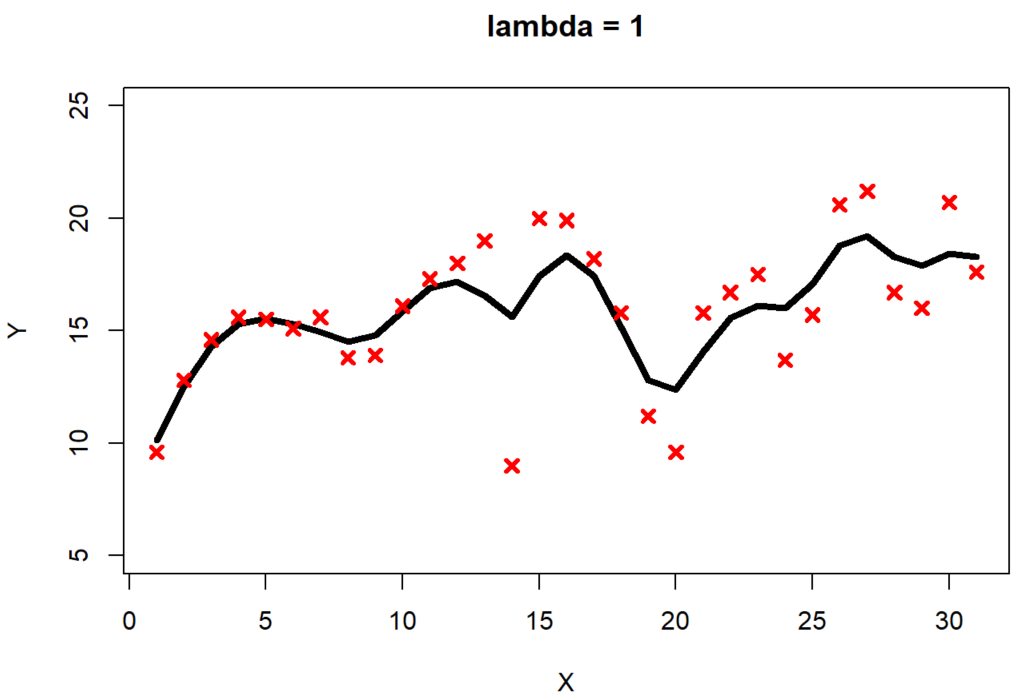
```r
yy <- c(9.6, 12.8, 14.6, 15.6, 15.5, 15.1, 15.6, 13.8, 13.9, 16.1, 17.3, 18, 19, 9, 20, 19.9, 18.2, 15.8, 1
1.2, 9.6, 15.8, 16.7, 17.5, 13.7, 15.7, 20.6, 21.2, 16.7, 16, 20.7, 17.6)

ploting_func <- function(ey, y, title = ""){
    x <- seq(from = 1, by = 1, length = length(ey))
    plot(x, ey, type = "n", ylim = c(5,25), xlab = "X", ylab = "Y", main = title)
    lines(x, ey, lwd = 4)
    points(x, y, pch = 4, lwd = 3, col = 'red')
}

ey_low <- smspe(yy, 0.01)
ey_medium <- smspe(yy, 0.1)
ey_high <- smspe(yy,1)

ploting_func(ey_low, yy, title = "lambda = 0.01")
```




```r
ploting_func(ey_medium, yy, title = "lambda = 0.1")
```




```
ploting_func(ey_high, yy, title = "lambda = 1")
```



각 lambda값에 따라 그래프를 그려보면, lambda가 크면 클수록 smoothness가 증가하는것을 알 수 있는데, 이는 $L = \sum_{i=1}^n(\hat{y_i} - y_i)^2 + \lambda \sum_{i=2}^{n-1}(\hat{y_{i-1}} - 2\hat{y_i} + \hat{y_{i+1}})^2$

에서, L을 최소화하는 $\hat{y_i}$들을 택하게 되는데,

lambda가 커질수록 smoothness와 관련된 $\sum_{i=2}^{n-1}(\hat{y_{i-1}} - 2\hat{y_i} + \hat{y_{i+1}})^2$를 최소화 해야하는 필요성이 더 커지기 때문에, smoothness가 커지게 된다.

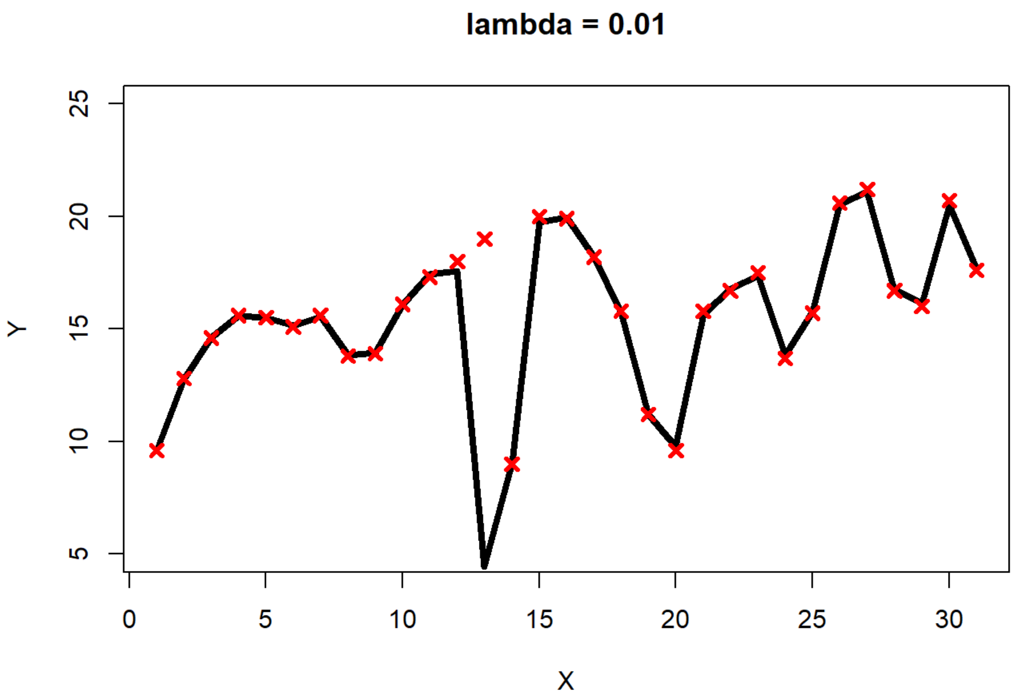
그에 반해 데이터의 fitidity 와 관련된 $\sum_{i=1}^n(\hat{y_i} - y_i)^2$를 낮게 유지할 필요성이 줄어들기 때문에, fitidity가 떨어지게 된다.

4-(b)

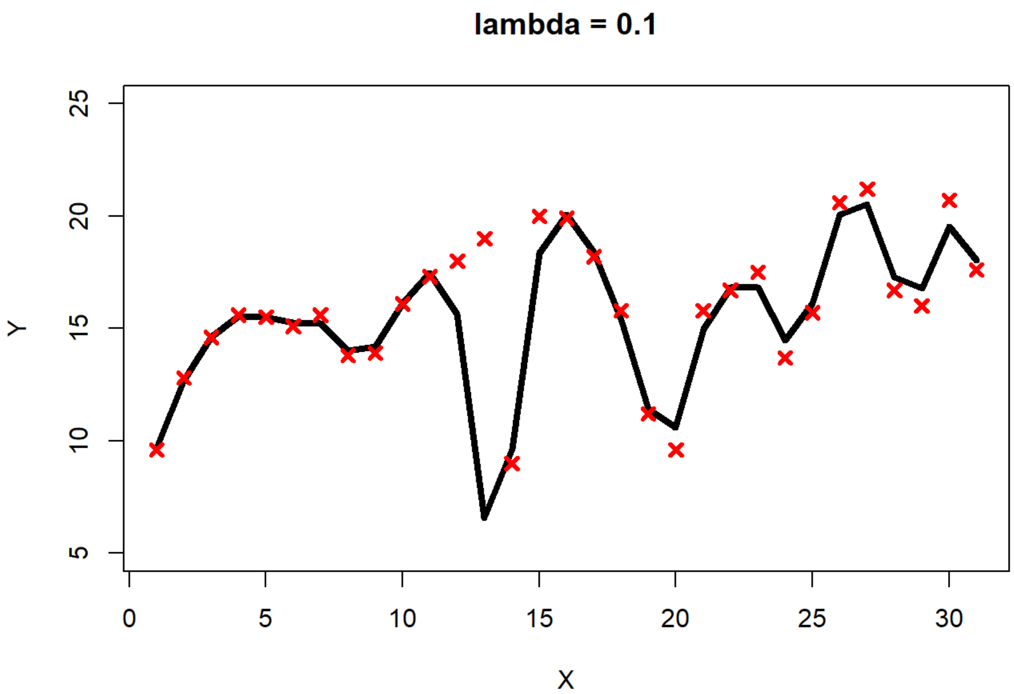
데이터가 변하게 되면 어떠한 영향을 미치는지 알아보자.

기존 y에서 13번째 데이터인 19에서 15를 빼본 데이터를 가지고 다시 한번 추정을 해본다.

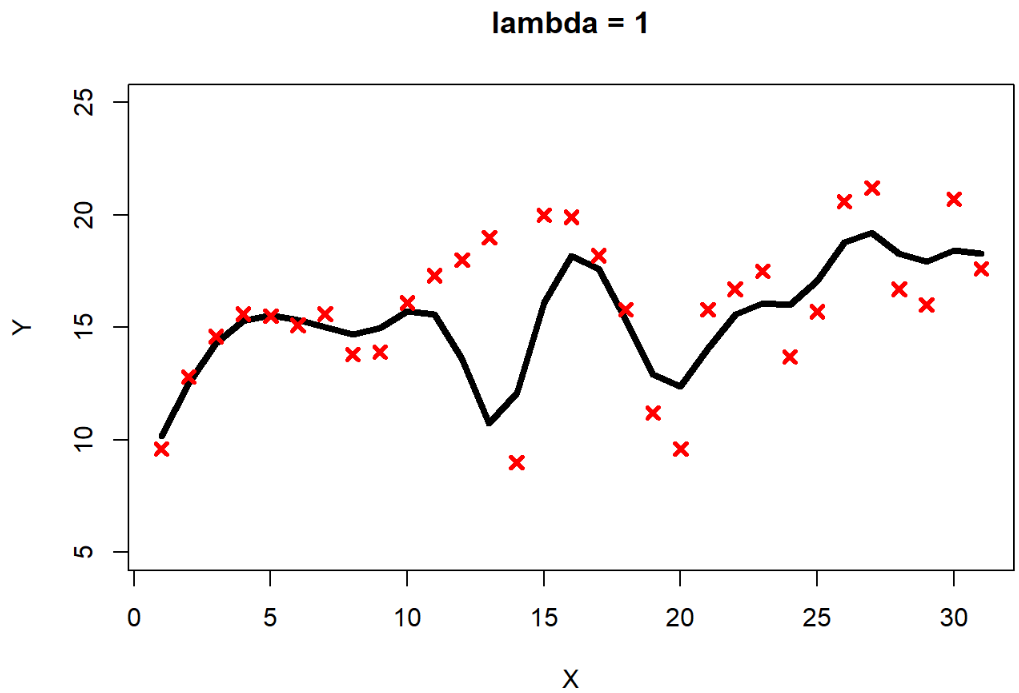
```
modified_y <- yy
modified_y[13] <- modified_y[13] - 15

modified_ey_low <- smspe(modified_y, 0.01)
modified_ey_medium <- smspe(modified_y, 0.1)
modified_ey_high <- smspe(modified_y,1)

ploting_func(modified_ey_low, yy, title = "lambda = 0.01")
```




```
ploting_func(modified_ey_medium, yy, title = "lambda = 0.1")
```




```
ploting_func(modified_ey_high, yy, title = "lambda = 1")
```



lambda가 커질수록, 기존 y값의 변화에 둔감해짐을 알 수 있다.

특히, lambda가 작은경우 fitidity가 높으므로, y값의 변화에 따라 그래프가 급격하게 변하게 됨을 확인할 수 있었다.

이제, hat matrix의 값을 다시 구해보자.

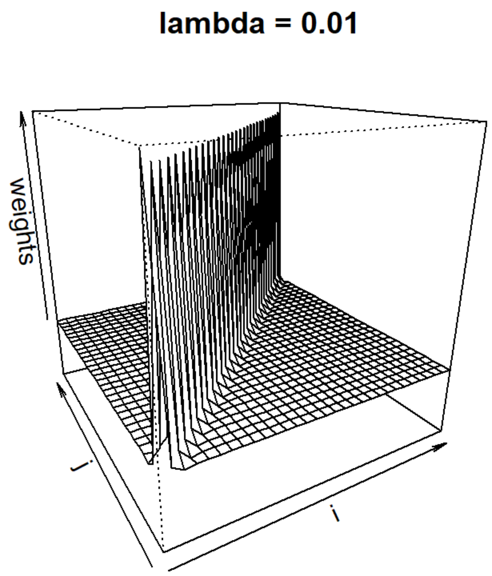
2-(b)에서와 같은 방법으로, hat matrix를 구할 수 있다.

y의 길이와, lambda값에 따라 smoothing spline의 hat matrix를 구해주는 함수와 그래프를 그려주는 함수를 만들고, lambda값에 따른 hat matrix를 받아오자.

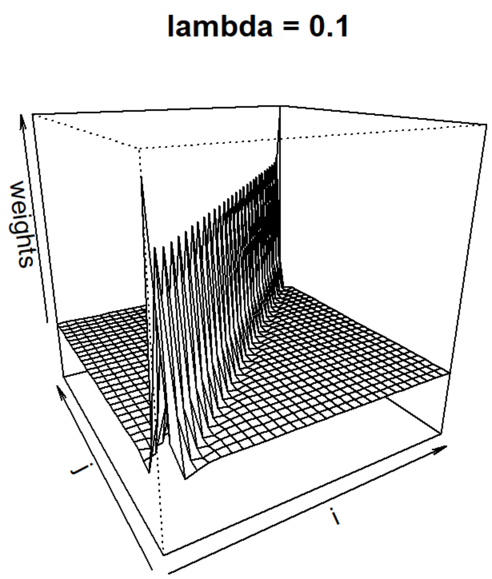
```
get_smooting_spline_hatmatrix <- function(yy, lambda)
{
    nd <- length(yy)
    xx <- seq(from = 1, by = 1, length = nd)
    hat <- matrix(0, ncol = nd, nrow = nd) #ndxnd zero matrix

    for(i in 1:nd){
        e <- rep(0, nd)
        e[i] <- 1   #make e_i, elementary vector.
        hat[,i] <- smspe(e, lambda)

        #get hatmatrix's ith column
    }
    #get hat, first check if hat is truely hat matrix.
    return(hat)

}
print_hatmatrix <- function(hat, title = ""){
    persp(hat, zlim = c(-0.3, 1), xlab = "i", ylab = "j", zlab = "weights", lab = c(3,3,3), theta = -30, ph
i = 20, main = title)
}

hat_low <- get_smooting_spline_hatmatrix(yy, 0.01)
hat_medium <- get_smooting_spline_hatmatrix(yy, 0.1)
hat_high <- get_smooting_spline_hatmatrix(yy, 1)
```

각 lambda값에 대해 hat matrix를 출력해보면 다음과 같다.

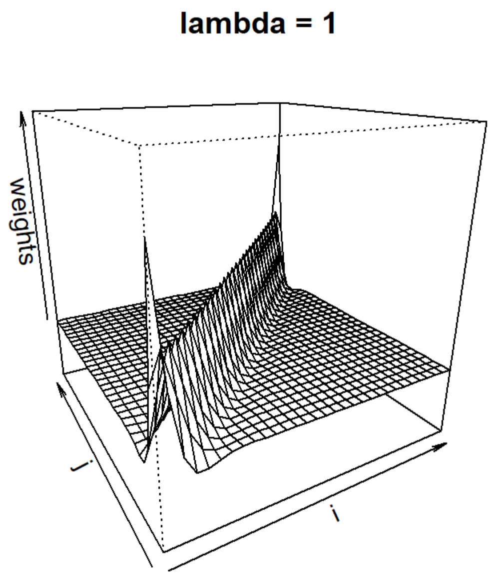
```
print_hatmatrix(hat_low,"lambda = 0.01")
```




```
print_hatmatrix(hat_medium,"lambda = 0.1")
```




```
print_hatmatrix(hat_high,"lambda = 1")
```



diagonal entry를 기준으로 값들이 symmetric함을 확인할 수 있고,

lambda가 작을수록 단위행렬 I와 비슷함을 알 수 있다.

함수를 이용해서 symmtericity를 확인해보면

```
isSymmetric.matrix(hat_low)
```

```
## [1] TRUE
```

```
isSymmetric.matrix(hat_medium)
```

```
## [1] TRUE
```

```
isSymmetric.matrix(hat_high)
```

```
## [1] TRUE
```

모두 True임이 확인된다.

4-(c)

solve 함수를 이용하여 역행렬을 구하자. solve(A) = A^{-1}을 계산해준다.

solve를 이용해 $(I + \lambda S)^{-1}$를 계산해주는 다음 함수를 만들었다.

```r
get_hatmatrix_direct <- function(yy, lambda)
{
    nd <- length(yy)

    ss <- c(1, -2, 1, rep(0, nd-3))
    ss <- rbind(ss, c(-2, 5, -4, 1, rep(0, length = nd - 4)))
    for(ii in 1:(nd - 4)){
        ss <- rbind(ss, c(rep(0, ii-1), 1, -4, 6, -4, 1, rep(0, nd - ii -4)))}
    ss <- rbind(ss, c(rep(0, length = nd - 4), 1, -4, 5, -2))
    ss <- rbind(ss, c(rep(0, length = nd - 3), 1, -2, 1))

    ssi <- diag(nd) + lambda*ss

    return(solve(ssi))
}

direct_hat_low <- get_hatmatrix_direct(yy, 0.01)
direct_hat_medium <- get_hatmatrix_direct(yy, 0.1)
direct_hat_high <- get_hatmatrix_direct(yy, 1)
```

이제, 각 hat matrix가 같은지 알기위해, 각 matrix의 원소의 차이가 어떻게 되는지 알아보면,

```r
max(abs(direct_hat_low - hat_low))
```

```
## [1] 0
```

```r
max(abs(direct_hat_medium - hat_medium))
```

```
## [1] 0
```

```r
max(abs(direct_hat_high - hat_high))
```

```
## [1] 0
```

각 matrix의 원소 차이의 절댓값들의 최대값이 0으로, 아예 matrix들이 같음을 알 수 있다.

즉, 앞에서 올바르게 hat matrix를 구했음을 알 수 있다.

Q5

5-(a)

5-(a)

$L=\sum_{i=1}^{n}(a_0+a_1x_i-y_i)^2$ 을 minimize하는 a_0, a_1의 값을 $\hat{a_0}, \hat{a_1}$이라 둘 때,

$\hat{a_0}=\bar{y}-\hat{a_1}\bar{x}$, $\hat{a_1}=\frac{S_{xy}}{S_{xx}}$ 임을 보여라.

$\left(\bar{y}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i,\ \bar{x}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i,\ S_{xx}=\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2,\ S_{xy}=\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})\right)$

$\frac{\partial L}{\partial a_0}=\sum_{i=1}^{n}2(a_0+a_1x_i-y_i)$, $\frac{\partial L}{\partial a_1}=\sum_{i=1}^{n}2(a_0+a_1x_i-y_i)x_i$ 가 성립하고,

L의 a_0, a_1에 대한 헤시안 행렬 $A=\begin{pmatrix}\frac{\partial^2 L}{\partial a_0^2} & \frac{\partial^2 L}{\partial a_0 a_1}\\ \frac{\partial^2 L}{\partial a_0 a_1} & \frac{\partial^2 L}{\partial a_1^2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2n & 2\sum_{i=1}^{n}x_i\\ 2\sum_{i=1}^{n}x_i & 2\sum_{i=1}^{n}x_i^2\end{pmatrix}$ 이 성립한다.

이때, $\frac{A}{2n}=\begin{pmatrix}1 & \bar{x}\\ \bar{x} & \overline{x^2}\end{pmatrix}=B$라 하면, 임의의 벡터 $z=\begin{pmatrix}a\\ b\end{pmatrix}$에 대해 $(a, b \in \mathbb{R})$

$z^tBz=a^2+2ab\bar{x}+b^2\overline{x^2}$ 가 성립하고, 이를 a에 대한 이차식으로 볼 때

$D/4=(b\bar{x})^2-b^2\overline{x^2}=b^2(\bar{x}^2-\overline{x^2})$ 이고,

코시-슈바르츠 부등식에 의해 $(c \cdot d)^2 \le \|c\|^2\|d\|^2$ 에서, (c, d는 임의의 벡터)

$c=(\frac{1}{n}, \frac{1}{n} \cdots \frac{1}{n})$, $d=(x_1, x_2 \cdots x_n)$ 이라 하면

$\bar{x}^2 \le \frac{1}{n}\cdot(\sum_{i=1}^{n}x_i^2)=\overline{x^2}$ 이 성립하고 $b^2 \ge 0$ 에서 $b^2(\bar{x}^2-\overline{x^2}) \le 0$ 으로,

따라서 $z^tBz \ge 0$ 이 성립하므로 B가 positive semidefinite matrix 이므로

$A=\frac{1}{2n}B$ 에서, A 역시 positive semidefinite matrix 이므로

L은 a_0, a_1에 대해 convex function 이 되고, 따라서

$\frac{\partial L}{\partial a_0}=0$, $\frac{\partial L}{\partial a_1}=0$ 으로 만드는 a_0, a_1에서 최소값을 가지게 된다.

→ 계속

5-(a) (계속)

따라서 $\hat{a_0}, \hat{a_1}$에 대해 다음과 같은 normal equation을 얻을 수 있다.

$$\sum_{i=1}^{n} 2(\hat{a_0}+\hat{a_1}x_i-y_i)=0 , \quad \sum_{i=1}^{n} 2(\hat{a_0}+\hat{a_1}x_i-y_i)x_i=0$$

이 두식을 정리하면,

$$n\hat{a_0} = \sum_{i=1}^{n} y_i - \hat{a_1}\sum_{i=1}^{n} x_i \qquad \hat{a_0}\sum_{i=1}^{n} x_i + \hat{a_1}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_iy_i \text{ 에서}$$

$$\hat{a_0} = \bar{y} - \hat{a_1}\bar{x} \cdots ① , \quad \hat{a_0}\bar{x} + \hat{a_1}\overline{x^2} = \overline{xy} \text{ 임을 알 수 있다.}$$

이제, ①을 이용해서 다음 식을 정리하면 $\left(\overline{x^2}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i^2,\ \overline{xy}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i\right)$

$$\bar{x}\bar{y} - \hat{a_1}\bar{x}^2 + \hat{a_1}\overline{x^2} = \overline{xy}$$

$\rightarrow \hat{a_1} = \dfrac{\overline{xy}-\bar{x}\bar{y}}{\overline{x^2}-\bar{x}^2}$ 가 성립하게 된다

이때, $\overline{x^2}-\bar{x}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i^2 - \bar{x}^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i^2-\bar{x}^2) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2$

$\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i^2-2x_i\bar{x}+\bar{x}^2) = \sum_{i=1}^{n}x_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n}x_i\bar{x} + \sum_{i=1}^{n}\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^{n}x_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n}\bar{x}^2 + \sum_{i=1}^{n}\bar{x}^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i^2-\bar{x}^2) \right)$

$\overline{xy}-\bar{x}\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_iy_i - \frac{1}{n}\bar{x}\sum_{i=1}^{n}y_i = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})y_i\right) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y})$

$\left(\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}) = \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})y_i - \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})\bar{y} = \sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})y_i \right)$

이므로,

$\hat{a_1} = \dfrac{\frac{1}{n}S_{xy}}{\frac{1}{n}S_{xx}} = \dfrac{S_{xy}}{S_{xx}} \cdots ②$ 임을 보였다

5-(b)

5-(b)

$\hat{y}_k = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 x_k = \bar{y} - \hat{a}_1 \bar{x} + \hat{a}_1 x_k = \bar{y} + (x_k - \bar{x}) \frac{S_{xy}}{S_{xx}}$ 로 이는 바로 보여진다.

이제, $y_k + \Delta y_k = y_k'$, $y_i = y_i'$ $(i \neq k)$ 라 하면,

$\overline{y'} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i + \frac{\Delta y_k}{n} = \bar{y} + \frac{1}{n} \Delta y_k$

$S_{xy}' = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i' - \overline{y'}) = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) y_i' = \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x}) y_i + \Delta y_k (x_k - \bar{x})$

$= \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + \Delta y_k (x_k - \bar{x}) = S_{xy} + \Delta y_k (x_k - \bar{x})$ 이므로,

5-(a)의 결과를 이용하여, $(x_i, y_i')_{i=1}^{n}$ 을 이용하여 구한 $\hat{a}_0'$, $\hat{a}_1'$ 은

$\hat{a}_1' = \frac{S_{xy}'}{S_{xx}} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} + \frac{\Delta y_k (x_k - \bar{x})}{S_{xx}}$

$\hat{a}_0' = \overline{y'} - \hat{a}_1' \bar{x} = \bar{y} + \frac{1}{n} \Delta y_k - \left(\frac{S_{xy}}{S_{xx}} + \frac{\Delta y_k (x_k - \bar{x})}{S_{xx}} \right) \bar{x}$ 가 성립한다,

이제, $\hat{y}_k' = y_k + \Delta y_k$ 에서, $\hat{y}_k' = \hat{y}_k + \Delta \hat{y}_k = \hat{a}_0' + \hat{a}_1' x_k$ 가 성립하므로

$\hat{a}_0' + \hat{a}_1' x_k = \bar{y} + \frac{1}{n} \Delta y_k - \left(\frac{S_{xy}}{S_{xx}} + \frac{\Delta y_k (x_k - \bar{x})}{S_{xx}} \right) \bar{x} + \frac{S_{xy}}{S_{xx}} x_k + \frac{\Delta y_k}{S_{xx}} (x_k - \bar{x}) x_k$

$= \bar{y} + \frac{\Delta y_k}{n} + \frac{1}{S_{xx}} \left((x_k - \bar{x}) S_{xy} + (x_k - \bar{x})^2 \Delta y_k \right)$ 가 됨을 알 수 있다.

따라서, $\hat{y}_k + \Delta \hat{y}_k = \bar{y} + \frac{\Delta y_k}{n} + \frac{(x_k - \bar{x}) S_{xy} + (x_k - \bar{x})^2 \Delta y_k}{S_{xx}}$ 임을 보였다.

5-(c),(d),(e)

5·(c) (b)로부터,

$$\Delta\hat{y}_k = (\hat{y}_k + \Delta\hat{y}_k) - \hat{y}_k = \frac{\Delta y_k}{n} + \frac{(x_k-\bar{x})^2}{S_{xx}}\Delta y_k$$ 임이 바로 보여진다.

5-(d)

앞의 결과를 이용해, $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$, $y' = \begin{pmatrix} y_1' \\ \vdots \\ y_n' \end{pmatrix}$ 이라 하면,

$Hy = \hat{y}$, $Hy' = \hat{y}'$ 임을 알고 있다.

이때, $i \neq k$ 일때 $y_i' = y_i$ 가 성립하므로 $l = y' - y = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \Delta y_k \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ 이 성립함을 안다.

따라서 $H(y'-y) = \hat{y}' - \hat{y}$ 가 성립하고, $\hat{y}' - \hat{y}$ 의 k번째 성분이

$\Delta\hat{y}_k = \frac{\Delta y_k}{n} + \frac{(x_k-\bar{x})^2}{S_{xx}}\Delta y_k$ 임을 아므로,

$\sum_{i=1}^{n} H_{ki} l_i = H_{kk}\cdot\Delta y_k = \frac{\Delta y_k}{n} + \frac{(x_k-\bar{x})^2}{S_{xx}}\Delta y_k$ 이므로, Δy_k는 임의대로 조정이 가능하므로,

$\Delta y_k \neq 0$로 놓으면 $H_{kk} = \frac{1}{n} + \frac{(x_k-\bar{x})^2}{S_{xx}}$ 임을 알 수 있다.

5-(e)

5-(d)의 결과를 이용하면,

$$\sum_{i=1}^{n} H_{ii} = \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{1}{n} + \frac{(x_i-\bar{x})^2}{S_{xx}}\right) = 1 + \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2}{S_{xx}} = 1 + \frac{S_{xx}}{S_{xx}} = 2$$ 임을 바로 보일 수 있다.

Processing math: 12%