Oulun yliopisto
Matemaattisten tieteiden laitos
Funktioiden estimointi
12. harjoitus, viikko 15, 2014

1. Tarkastelemme painotettua lineaarista pienimmän neliösumman tehtävää

$$\text{minimoi } (y - X\alpha)^T W (y - X\alpha),$$

jossa X on annettu $n \times p$-matriisi, y on annettu $n \times 1$-vektori, W on annettu symmetrinen, positiivisesti definiitti $n \times n$-matriisi ja $p \times 1$-vektori α pitää määrätä optimaalisesti.

Osoita, että jos matriisi $X^T W X$ on positiivisesti definiitti, niin tehtävällä on yksikäsitteinen ratkaisu

$$\hat{\alpha} = (X^T W X)^{-1} X^T W y.$$

(Voit edetä jommallakummalla seuraavista tavoista. (1) Totea, että $\hat{\alpha}$ on kohdefunktion gradientin ainoa nollakohta; päättele, että kyseessä on minimikohta laskemalla kohdefunktion Hessen matriisi (pisteessä $\hat{\alpha}$) ja toteamalla, että se on positiivisesti definiitti. (2) Kirjoita $W = W^{1/2} W^{1/2}$, kerro $W^{1/2}$ sulkujen sisälle ja sovella tietojasi tavallisen lineaarisen pienimmän neliösumman tehtävän ratkaisusta.)

2. Johda lokaalille lineaariselle regressiolle luentojen kaava (4.10). (Vihje: valitse y, X ja W siten, että voit kirjoittaa lokaalin lineaarisen regression kohdefunktion muotoon $(y - X\alpha)^T W (y - X\alpha)$ sekä sovella yllä annettua $\hat{\alpha}$:n kaavaa.)

3. Todista, että jos luentojen määritelmässä 4.6 (kertalukua r oleva splini) sileysvaatimus (ii) muutetaan muodosta $g \in C^{r-2}(\mathbb{R})$ muotoon $g \in C^{r-1}(\mathbb{R})$, niin uusi vaatimus pakottaa g:n olemaan tavallinen polynomi.

4. Tässä tehtävässä täydennämme luennoilla esitetyn päättelyn, jonka mukaan annettuun n solmupisteeseen liittyvät kuutiosplinit muodostavat $(n+4)$-dimensioisen vektoriavaruuden.

Muodostukoon vektoriavaruus S kertalukua 4 olevista splineistä (ts. kuutiollisista splineistä) solmupistein $x_1 < x_2 < \cdots < x_n$. Määritellään lisäksi palapolynomien muodostama vektoriavaruus P siten, että kukin $g \in P$ rajoitettuna kullekin $(n+1)$ osavälille

$$]-\infty, x_1], [x_1, x_2[, \ldots, [x_{n-1}, x_n[, [x_n, \infty[$$

on korkeintaan astetta 3 oleva polynomi (mitään jatkuvuusehtoja ei nyt vaadita solmupisteissä). Tällöin P on vektoriavaruus, jolle $\dim P = 4(n+1)$ (koska kunkin palan määräämiseen tarvitaan 4 kerrointa). Määritellään lineaarikuvaus $L : P \to \mathbb{R}^{3n}$ siten, että

$$(Lg)_j = g^{(k)}(x_i + 0) - g^{(k)}(x_i - 0), \quad j = 3(i-1) + k + 1,$$

jossa k saa arvot 0, 1, 2 ja i arvot $1, \ldots, n$, jolloin j saa arvot $1, \ldots, 3n$. (Lg:n j:s komponentti on siis g:n k:nnen derivaatan oikeanpuolisen ja vasemmanpuolisen raja-arvon erotus pisteessä x_i.) Tällöin S on kuvauksen L nolla-avaruus, eli

$$S = N(L) = \{g \in P : Lg = 0\}.$$

Luennoissa s. 144 tehtiin uskottavaksi, että $\dim S = n + 4$ vähentämällä $\dim P$:stä sidosehtojen määrä $3n$. Tarkempi päättely vetoaa lineaarialgebran dimensiolauseeseen, joka kertoo, että

$$\dim S = \dim P - \dim R(L),$$

jossa $R(L)$ on kuvauksen L kuva-avaruus

$$R(L) = \{y \in \mathbb{R}^{3n} : y = Lg \text{ jollekin } g \in P\}.$$

Tämän perusteella saamme todistettua tuloksen $\dim S = n+4$, kun ensin todistamme, että $\dim R(L) = 3n$, eli että $R(L) = \mathbb{R}^{3n}$. Tätä varten riittää todistaa (lineaarisuuden nojalla), että jokainen $\mathbb{R}^{3n}$:n standardikannan kantavektori

$$e_j = [0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0]^T$$

saavutetaan jollakin g, eli että kaikilla j on olemassa $g \in P$ siten, että $Lg = e_j$.

Tehtävänäsi on konsturoida tällaiset palapolynomit g.

5. Todista edellisen tehtävän ideoita käyttäen, että kertalukua 4 olevat luonnolliset splinit NS solmupistein $x_1 < \cdots < x_n$ muodostavat vektoriavaruuden, jolle

$$\dim \mathrm{NS} = n.$$