I modelli additivi

Data Mining
CLAMSES - University of Milano-Bicocca

Aldo Solari

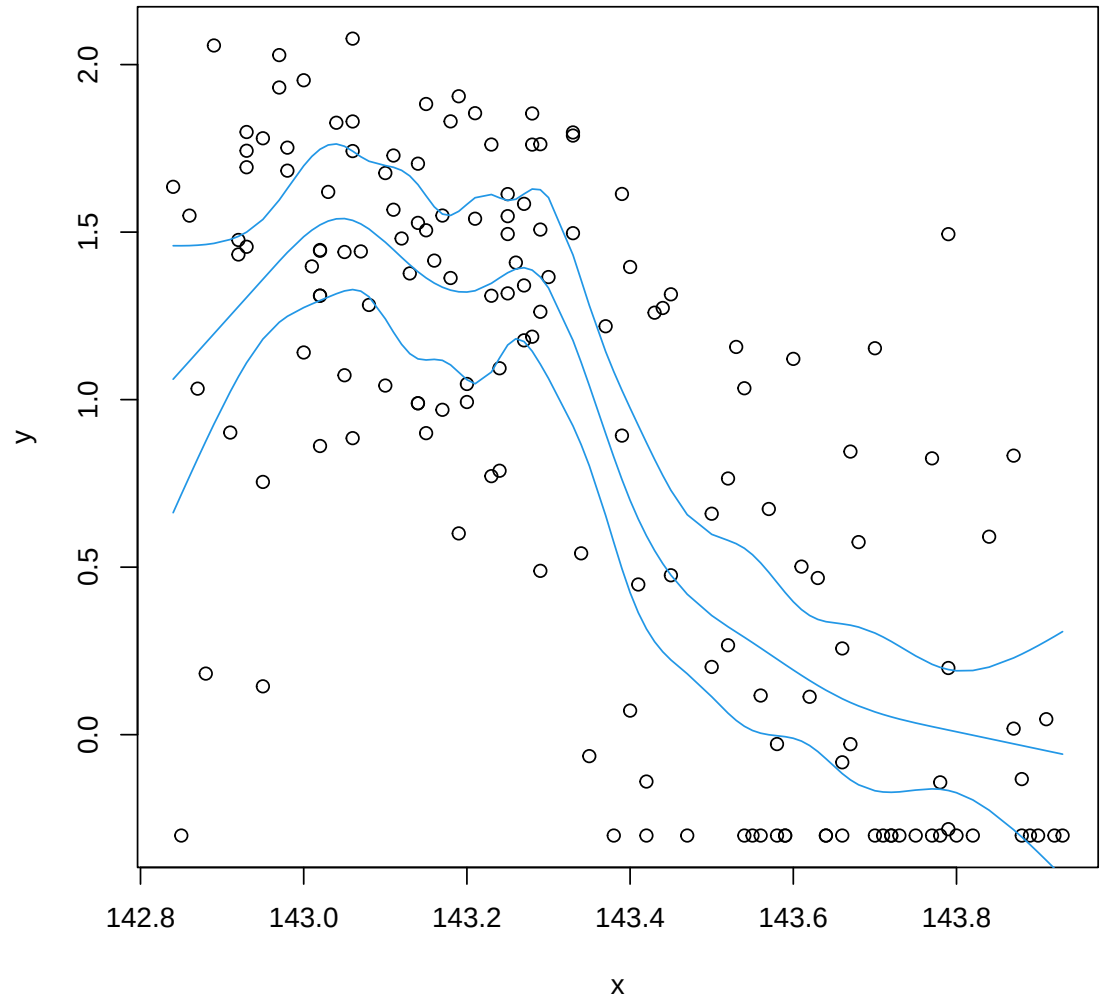
Riferimenti bibliografici

- Bowman, Evers. Lecture Notes on Nonparametric Smoothing. § 4.4
- AS § 4.5
- LKA § 6.3
- HTF § 9.1.1, 9.1.2

Dati della Grande Barriera Corallina

È stata effettuata un'indagine sulla fauna del fondale marino compreso tra la costa del Queensland settentrionale e la Grande Barriera Corallina. La regione di campionamento copriva una zona chiusa alla pesca commerciale, nonché zone limitrofe dove era consentita la pesca.

La relazione tra il punteggio di cattura (`Score1`) e la longitudine (`Longitudine`) è di particolare interesse perché, in questa posizione geografica, la costa corre all'incirca da nord a sud e quindi la longitudine è un proxy per la distanza al largo. Potremmo quindi ragionevolmente aspettarci che l'abbondanza di vita marina cambia con la longitudine.



Spline cubica naturale con $K = 9$ nodi (interni)

È raro avere problemi che coinvolgono solo una singola covariata. Per i dati della Grande Barriera Corallina l'estensione naturale è esaminare la relazione tra il punteggio di cattura (y) e la latitudine (x_1) e longitudine (x_2), in un modello

$$y_i = f(x_{1i}, x_{2i}) + \varepsilon_i$$

Un modello additivo ha la forma

$$y_i = f_1(x_{1i}) + f_2(x_{2i}) + \varepsilon_i$$

dove le funzioni componenti f_1 e f_2 descrivono gli effetti separati e additivi di le due covariate

Per stimare

$$y_i = \beta_0 + f_1(x_{1i}) + f_2(x_{2i}) + \varepsilon_i$$

ri-arrangiamo i termini:

$$y_i - \beta_0 - f_2(x_{2i}) = f_1(x_{1i}) + \varepsilon_i$$

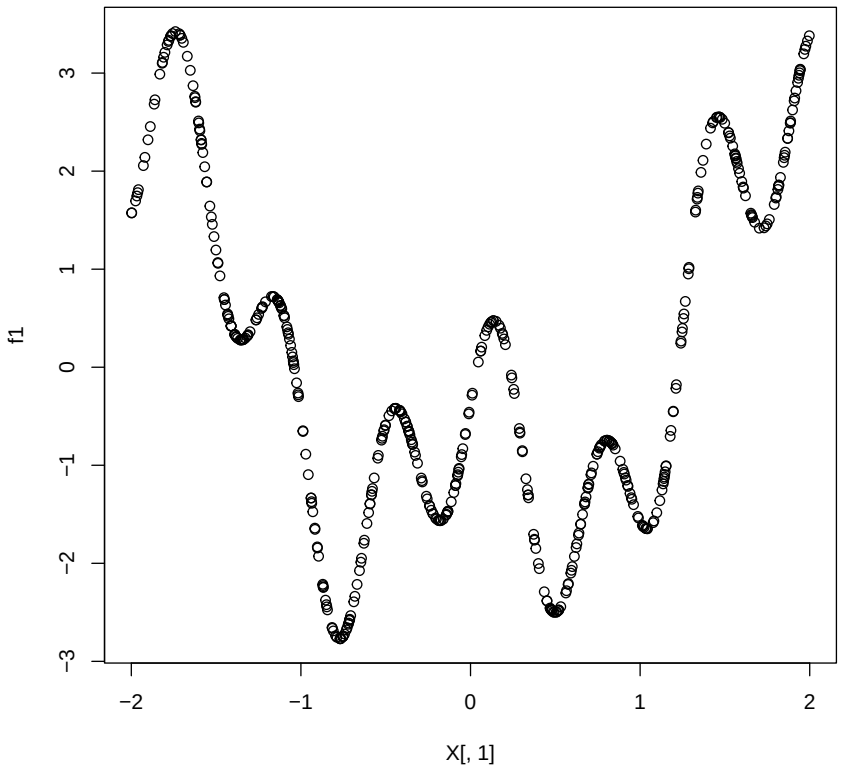
Ciò suggerisce di stimare f_1 con una funzione regolare (*smooth*) s_1:

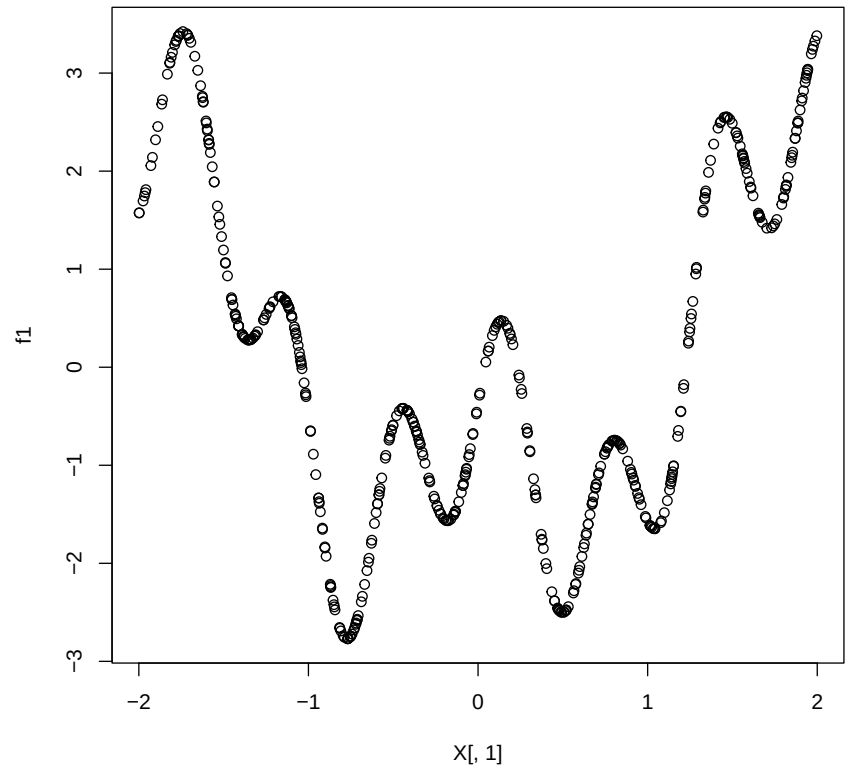
$$\hat{f}_1 = s_1(y - \bar{y} - \hat{f}_2 \sim x_1)$$

e analogamente, (ri)-stimare f_2 come

$$\hat{f}_2 = s_2(y - \bar{y} - \hat{f}_1 \sim x_2)$$

La ripetizione di questi passaggi fornisce una forma semplice dell'algoritmo di *backfitting*. La stessa idea si applica quando abbiamo più di due componenti sul modello.


f1
X[, 1]
−3
−2
−1
0
1
2
3
−2
−1
0
1
2


f1
X[, 1]
−3
−2
−1
0
1
2
3
−2
−1
0
1
2

Il modello additivo per la regressione prevede che il valore atteso della variabile risposta sia una somma di contributi parziali, uno per ciascuna variabile predittiva

$$\mathbb{E}(Y|X = x) = \beta_0 + \sum_{j=1}^{p} f_j(x_j)$$

Ciò include il modello lineare come caso speciale, dove

$$f_j(x_j) = \beta_j x_j$$

ma è più generale, perché le f_j possono essere funzioni arbitrarie

Abbiamo bisogno di aggiungere a restrizione per renderlo identificabile; senza perdita di generalità

$$\sum_{i=1}^{n} f_j(x_{ij}) = 0, \qquad j = 1, \ldots, p$$

Algoritmo di Gauss-Seidel

- Given:
  - $n \times p$ matrix $\mathbf{X}$ of p predictors
  - $n \times 1$ response vector $\mathbf{y}$
  - small tolerance $\delta > 0$
- Center $\mathbf{y}$ and each column of $\mathbf{X}$
- Initialize $\hat{\beta}_j \leftarrow 0$ for $j = 1, \ldots, p$
- Until (all $|\hat{\beta}_j - \gamma_j| \leq \delta$)
  for $k = 1, \ldots, p$
  $r_i^{(k)} = y_i - \sum_{j \neq k} \hat{\beta}_j x_{ij}$
  $\gamma_k \leftarrow$ regression coefficient of $r^{(k)}$ on x_k
  $\hat{\beta}_j \leftarrow \gamma_k$
- $\hat{\beta}_0 \leftarrow \bar{y} - \sum_{j=1}^{p} \hat{\beta}_j \bar{x}_j$ with original data
- Return $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$

Esercizio 1

Generare i dati come segue:

```
n = 100
set.seed(1)
x1 = rnorm(n)
x2 = rnorm(n)
x3 = rnorm(n)
y = 30 - 10*x1 + 20*x2 + 30*x3 + rnorm(n)
fit = lm(y ~ x1+x2+x3)
X = model.matrix(fit)
```

Ottenere la stima di β con l'algoritmo di Gauss-Seidel

Algoritmo di backfitting

- Given:
  - $n \times p$ matrix of p predictors
  - $n \times 1$ response vector
  - maxit: maximum number of iterations
  - one-dimensional smoother s
- Initialize $\hat{\beta}_0 \leftarrow \bar{y}$ and $\hat{f}_j \leftarrow 0$ for $j = 1, \ldots, p$
- for (b in 1 : maxit)
  for $k = 1, \ldots, p$
  $r_i^{(k)} = y_i - \hat{\beta}_0 - \sum_{j \neq k} \hat{f}_j(x_{ij})$
  $g_k \leftarrow s(r^{(k)} \sim x_k)$
  $g_k \leftarrow g_k - n^{-1} \sum_{i=1}^{n} g_k(x_{ik})$
  $\hat{f}_k \leftarrow g_k$
- Return $\hat{\beta}_0, \hat{f}_1, \ldots, \hat{f}_p$

Esercizio 2

Generare i dati come segue:

```
set.seed(123)
n <- 500; p <- 4
X <- matrix(runif(n * p, min = -2, max = 2), ncol = p)
f1 <- cos(X[,1] * 4) + sin(X[,1] * 10) + X[,1]^(2)
f2 <- -1.5 * X[,2]^2 + (X[,2] > 1) * (X[,2]^3 - 1)
f3 <- 0
f4 <- sign(X[,4]) * 1.5
f1 <- f1 - mean(f1); f2 <- f2 - mean(f2)
f3 <- f3 - mean(f3); f4 <- f4 - mean(f4)
y <- 10 + f1 + f2 + f3 + f4 + rnorm(n, sd = 1.2)
```

Ottenere la stima di $f_1, \ldots, f_4$ utilizzando l'algoritmo di backfitting con la funzione `smooth.spline`