

POLITECNICO DI MILANO  
SCUOLA DI INGEGNERIA INDUSTRIALE E DELL'INFORMAZIONE  
CORSO DI STUDI IN INGEGNERIA MATEMATICA



TESI DI LAUREA MAGISTRALE

REGRESSIONE CON REGOLARIZZAZIONI DIFFERENZIALI PER DATI  
SPAZIO-TEMPORALI, CON APPLICAZIONE ALL'ANALISI DELLA  
PRODUZIONE DI RIFIUTI URBANI NELLA PROVINCIA DI VENEZIA

RELATORE: PROF. LAURA MARIA SANGALLI  
CORRELATORE: DOTT. ING. MARA SABINA BERNARDI

TESI DI LAUREA DI:  
GABRIELE MAZZA  
MATR. 798794

ANNO ACCADEMICO 2013/2014



*Alla mia famiglia*



---

## Sommario

---

Il presente lavoro di tesi propone un modello separabile per la regressione di dati distribuiti in spazio e tempo. Il modello è particolarmente adatto allo studio di problemi con domini spaziali complessi, con concavità o buchi. La capacità di tener conto della geometria spaziale rappresenta un forte vantaggio per questo modello, che sarà paragonato alle altre tecniche già esistenti per lo studio di dati spazio-temporali. Oltre al modello è stato sviluppato un algoritmo e un codice R per il calcolo computazionale della stima. La principale applicazione studiata in questa tesi riguarda la produzione di rifiuti urbani pro capite nei comuni della provincia di Venezia tra il 1997 e il 2011, con una particolare attenzione agli effetti legati al turismo.



---

## Abstract

---

The present work of thesis proposes a separable model for the regression of data distributed in space and time. The model is particularly appropriate for the study of problems with complex spatial domains, with concavities or holes. The ability to consider the spatial geometry is a strong advantage of this model, which will be compared to other existing techniques for the study of spatio-temporal data. In addition to the model, an algorithm and an R code for the computation of the estimate has been developed. The main application studied in this thesis regards the production of urban waste per capita in the municipalities of Venice province between 1997 and 2011, with a particular attention to the effects related to tourism.



---

## Ringraziamenti

---

Tra pochissimo consegnerò questa tesi ed è ora di mettere mano ai ringraziamenti. Questo capitolo sarà il più letto da chi sarà presente il giorno della mia laurea e voglio scriverlo senza troppi ripensamenti. Se mi guardo indietro vedo tantissime persone che mi hanno aiutato e sostenuto in questi anni. Non potrò mai elencare tutti ma confido che chi non sarà ricordato non se la prenda e mi perdoni per la piccola dimenticanza.

Il primo ringraziamento va senza dubbio alla prof.ssa Sangalli, per avermi concesso la possibilità di lavorare a questa tesi, interessante e stimolante. Ringrazio soprattutto per avermi seguito e ascoltato anche nel periodo della maternità. Ringrazio anche Mara per il preziosissimo aiuto, in particolare nel rush finale prima della consegna. Spero che quanto fatto possa essere utile anche ai vostri progetti futuri.

In seguito ringrazio i miei genitori, che mi hanno concesso l'opportunità di studiare, e i miei fratelli Andrea, Francesco, Elisabetta, Alberto e Simone che da sempre hanno creduto in me e che mi sopportano quotidianamente. Grazie anche a mia nonna per tutti i pranzi di questi ultimi mesi!

Senza dubbio questi anni di studio sarebbero stati più difficili senza le persone che ho conosciuto. Per prime ringrazio Irene e Soara, con cui ho anche trascorso ore ed ore di viaggi in treno, attese in stazioni, avventure, ritardi e imprevisti. Ringrazio anche Mattia, Margherita, Marc, Aureliana, Debora, Stefania, Valeria, Chiara, Giovanni e Gianfi per tutto quello che abbiamo passato insieme.

Ringrazio Giacomo, Giovanni, Francesco, Marco, Francesco, Simone, Luca, Martino e Davide, con cui condivido i momenti più belli e più importanti della vita. Grazie di tutto quello che siete stati per me in questi anni! Comunque andrà dal giorno successivo alla mia laurea, so che sarò sempre parte di un branco!

Nonostante mi stia laureando in Ingegneria Matematica con specialistica in Statistica non potrei mai riuscire a stimare le ore passate a studiare tra i muri gialli e arancioni della San Benedetto. Grazie ad Anna, Benedetta, Giuseppe, Andrea, Elena, Florenzo, Francesco, Paolo e a tutti coloro che hanno studiato con me nelle sacre stanze in questi anni. Grazie a Don Valerio, anche per i numerosi caffè offerti! Infine, una ringraziamento particolare va a Grazia, con cui ho condiviso tantissime esperienze in questi anni di università.

Se mi fermo un attimo a pensare mi rendo conto che spesso basta poco per essere d'aiuto ad una persona. Quanti in questi anni sono stati per me un sostegno, anche solo con un "Coraggio!", un "In bocca al lupo!" prima di un esame o una preghiera. Tra fratelli di comunità, gruppo, e amici vari non potrei riuscire a contarvi... e toglierei spazio alla tesi (ora leggetevi anche quella, se avete il coraggio!). Mi rendo conto che sono circondato da tantissime persone che mi vogliono bene. Siete per me un regalo grande. Grazie di cuore a tutti voi!

---

## Indice

---

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modello di regressione spazio-temporale con regolarizzazioni differenziali</b>	<b>5</b>
2.1	Caso senza covariate . . . . .	5
2.1.1	Dati e modello . . . . .	5
2.1.2	Definizione delle funzioni di base . . . . .	6
2.1.3	Funzionale di penalizzazione . . . . .	7
2.1.4	Modello ideale . . . . .	8
2.1.5	Discretizzazione dei termini di penalizzazione . . . . .	9
2.1.6	Soluzione del problema di stima . . . . .	12
2.1.7	Proprietà statistiche dello stimatore . . . . .	14
2.2	Caso con covariate . . . . .	14
2.2.1	Proprietà statistiche degli estimatori . . . . .	16
2.3	Stima della varianza di modello e scelta dei parametri di smoothing . . . . .	16
2.3.1	Varianza di modello . . . . .	16
2.3.2	Parametri di smoothing . . . . .	17
<b>3</b>	<b>Sviluppo del codice R</b>	<b>19</b>
3.1	Funzioni di base considerate . . . . .	19
3.2	Schematizzazione dell'algoritmo di stima . . . . .	20
3.3	Strutture dati adottate . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Studi di simulazione</b>	<b>23</b>
4.1	Triangolazione e istanti temporali . . . . .	24
4.2	Caso senza covariata . . . . .	25
4.3	Caso con covariata . . . . .	28

4.3.1	Validazione dell'intervallo di confidenza approssimato	31
<b>5</b>	<b>Confronto con altri metodi</b>	<b>33</b>
5.1	Caso senza covariata . . . . .	35
5.2	Caso con covariata . . . . .	37
<b>6</b>	<b>Applicazione alla produzione di rifiuti urbani nella provincia di Venezia</b>	<b>39</b>
6.1	Il turismo come possibile covariata . . . . .	40
6.2	Trattamento del dominio . . . . .	41
6.2.1	Regression Splines . . . . .	42
6.2.2	Replica dei dati . . . . .	43
6.2.3	Triangolazione del dominio . . . . .	45
6.3	Analisi preliminare dei dati . . . . .	45
6.3.1	Funzioni di base . . . . .	48
6.4	Applicazione del modello senza covariata . . . . .	49
6.5	Applicazione del modello con covariata . . . . .	53
<b>7</b>	<b>Conclusioni e sviluppi futuri</b>	<b>59</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>61</b>

---

## Elenco delle figure

---

1.1	Dominio spaziale e locazioni dei dati . . . . .	1
1.2	Rifiuti urbani pro capite nel 2011 . . . . .	2
1.3	Differenza tra i dati nei comuni di Cavallino-Treporti e Quar-	
	to d'Altino . . . . .	2
3.1	Funzioni di base implementate nel codice . . . . .	20
4.1	Funzione spaziale $g(\mathbf{p})$ . . . . .	23
4.2	Triangolazione del dominio a forma di C . . . . .	24
4.3	Stime della funzione $f(\mathbf{p}, t)$ ad alcuni istanti di tempo, caso	
	senza covariata . . . . .	26
4.4	Evoluzione temporale in alcuni nodi della triangolazione,	
	caso senza covariata . . . . .	27
4.5	Stime della funzione $f(\mathbf{p}, t)$ ad alcuni istanti di tempo, caso	
	con covariata . . . . .	29
4.6	Evoluzione temporale in alcuni nodi della triangolazione,	
	caso con covariata . . . . .	30
4.7	p-values corretti per $\hat{f}(\mathbf{p}, t)$ . . . . .	31
5.1	Confronto tra i metodi, caso senza covariata . . . . .	35
5.2	Per alcuni istanti di tempo, funzione test $f(\mathbf{p}, t)$ reale, dati	
	simulati, stime ottenute rispettivamente con kriging spazio-	
	temporale, modelli basati su thin plate splines, modelli ba-	
	sati su soap film smoothing, ST-PDE, caso senza covariata .	36
5.3	Confronto tra i metodi, caso con covariata . . . . .	37
5.4	Per alcuni istanti di tempo, funzione test $f(\mathbf{p}, t)$ reale, dati	
	simulati, stime ottenute rispettivamente con modelli basati	
	su thin plate splines, modelli basati su soap film smoothing,	
	ST-PDE, caso con covariata . . . . .	38

---

6.1	Poligoni disponibili nel pacchetto <i>raster</i> . . . . .	41
6.2	Smoothing con <i>Regression Splines</i> cubiche per il primo poligono dell'entroterra della provincia di Venezia . . . . .	42
6.3	Frontiera e punti spaziali per la provincia di Venezia . . . . .	43
6.4	Dati replicati . . . . .	44
6.5	Triangolazione della provincia di Venezia . . . . .	45
6.6	Rifiuti urbani pro capite ogni due anni dal 1997 al 2011 . . . . .	46
6.7	Posti letto pro capite in strutture ricettive ogni due anni dal 1997 al 2011 . . . . .	47
6.8	Andamento temporale della produzione dei rifiuti urbani nei comuni . . . . .	48
6.9	Comuni selezionati per l'analisi dei risultati . . . . .	49
6.10	Stima della funzione spazio-temporale della produzione di rifiuti urbani pro capite nella provincia di Venezia a tempi fissati dal 1997 al 2011, caso senza covariata . . . . .	51
6.11	Stima della produzione di rifiuti urbani pro capite in alcuni comuni, caso senza covariata . . . . .	52
6.12	Stima della parte funzionale della produzione di rifiuti urbani pro capite nella provincia di Venezia a tempi fissati dal 1997 al 2011, caso con covariata . . . . .	55
6.13	Stima della parte funzionale della produzione di rifiuti urbani pro capite in alcuni comuni, caso con covariata . . . . .	56

---

## Elenco delle tabelle

---

- 3.1 Tempo di calcolo della stima di  $\hat{c}$  (in secondi) nelle simulazioni eseguite sul dominio a forma di C . . . . . 22



# CAPITOLO 1

## Introduzione

Il presente lavoro di tesi si occupa della costruzione e dell'applicazione di un modello di regressione per dati varianti in spazio e in tempo. Questo studio è motivato dalla necessità di avere un buon metodo d'analisi per dati distribuiti su un dominio spaziale complesso, con concavità o buchi. Il modello sarà applicato ai dati riguardanti la produzione dei rifiuti urbani pro capite nella provincia di Venezia tra il 1997 al 2011, raccolti dall'Agenzia Regionale per la Prevenzione e Protezione Ambientale del Veneto (Arpav) e disponibili sul sito di Open Data Veneto<sup>1</sup>. In fig. 1.1 è rappresentata la descrizione del dominio con i comuni e le località turistiche di rilievo.

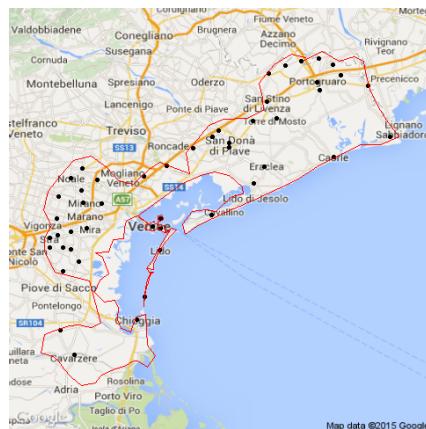


Figura 1.1: Dominio spaziale e locazioni dei dati

<sup>1</sup><http://dati.veneto.it/dataset/produzione-annua-di-rifiuti-urbani-totale-e-pro-capite-1997-2011>

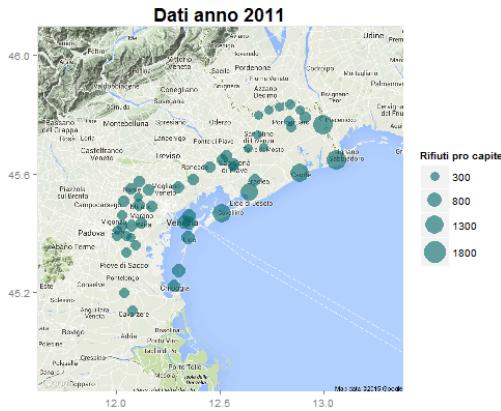


Figura 1.2: Rifiuti urbani pro capite nel 2011

In fig. 1.2 sono visualizzati i valori dei rifiuti sul territorio nel 2011. L’analisi di questi dati potrebbe essere influenzata dagli effetti legati al turismo nella regione, pertanto il modello dovrà tener conto anche di questa possibilità.

Il problema della produzione dei rifiuti nella provincia di Venezia richiede la formulazione di un modello appropriato. Infatti, in questo caso la geometria del dominio è complessa a causa della concavità dovuta alla laguna di Venezia o della presenza di isole.

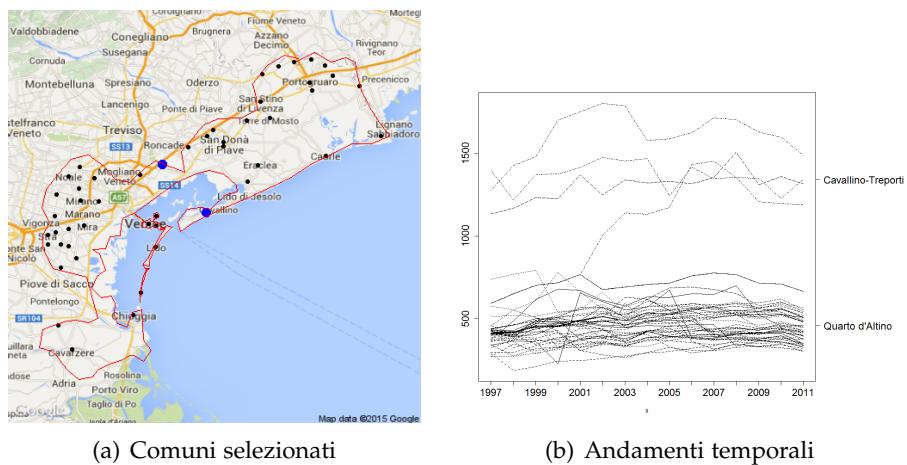


Figura 1.3: Differenza tra i dati nei comuni di Cavallino-Treporti e Quarto d’Altino

Si consideri ad esempio quanto riportato in fig. 1.3. Sono stati evidenziati i comuni di Quarto d’Altino e Cavallino-Treporti, tra di loro non distanti in linea d’aria ma con valori di produzione di rifiuti decisamente diversi (come si può notare dagli andamenti temporali). Se i dati fossero

analizzati con una tecnica che non tiene conto della geometria spaziale i due comuni sarebbero ritenuti vicini tra loro, quando in realtà si ha una grande separazione dovuta alla laguna di Venezia. Tecniche che trascurano la forma del dominio non sono appropriate poiché porterebbero ad una cattiva stima del fenomeno.

Sono già disponibili modelli per l'analisi di dati distribuiti in spazio e tempo ma non tutti sono adatti al caso di domini spaziali influenti. Una referenza classica per dati di questa tipologia è rappresentata da [6]. Esiste una letteratura più recente che nasce dall'ambito dell'analisi di dati funzionali (descritto ampiamente in [16]) e che studia, tramite kriging, curve tempo-varianti con dipendenza spaziale ([4], [11] e [12]). Questa tecnica, però, non considera la forma del dominio spaziale. Altre proposte sono esposte in [1] e [10], attraverso metodi e applicazioni per l'analisi di dati spazio-temporali su domini irregolari. L'approccio seguito sarà simile a quello sviluppato da queste pubblicazioni.

In questa tesi sarà illustrato il modello di Regressione Spazio-Temporale con Penalizzazioni Differenziali (ST-PDE). Questo modello si dimostrerà in grado di assolvere pienamente questo compito e di fornire una buona stima dell'andamento della produzione di rifiuti urbani nella provincia di Venezia. La funzione sarà stimata dalla minimizzazione di un funzionale di penalizzazione con termini differenziali per garantire anche la regolarità della stima. La funzione stimata sarà espressa secondo opportune funzioni di base (elementi finiti in spazio, B-splines in tempo) capaci di tener conto della geometria spaziale. Tramite l'aggiunta di un termine con covariata sarà possibile introdurre anche l'effetto del turismo. Dalla modellizzazione matematica è stato sviluppato un algoritmo e il conseguente codice R per il calcolo della soluzione numerica del problema di stima.

Per sviluppare il modello ST-PDE è stata presa ispirazione non soltanto da quanto fatto in [1] e [10], ma anche da ciò che si ritrova in [19], dove è studiato un modello solamente spaziale e definito su un dominio con le stesse caratteristiche che saranno studiate in questa tesi (definizione complessa, concavità o buchi). Per poter stimare il fenomeno in analisi è introdotto un funzionale di penalizzazione con termini differenziali. Il problema di minimo è risolto attraverso il passaggio ad una forma variazionale che, a seguito dell'introduzione di un'opportuna espansione in elementi finiti, è ridotta ad un problema discreto da cui si ricava la stima grazie alla risoluzione di un sistema lineare. L'articolo [19] non contempla la variazione temporale ma può essere considerato il punto di partenza per il modello ST-PDE. Non sarà ricavata una forma variazionale per la stima della soluzione, ma l'attenzione alla geometria del problema e l'uso degli elementi finiti rappresentano un forte legame con il modello ST-PDE.

Il lavoro di tesi è strutturato come segue. Nel capitolo 2 è presentata la costruzione del modello matematico ST-PDE, seguita dallo sviluppo del codice R descritto nel capitolo 3. Nel capitolo 4 si hanno i primi risul-

tati, derivanti dall'applicazione del modello e del codice R a simulazioni eseguite sul dominio a forma di C descritto in [18] e [27], per il quale è possibile valutare la bontà delle stime ottenute grazie alla perfetta conoscenza del fenomeno reale in ogni punto e in ogni istante. Nel capitolo 5 il modello ST-PDE è paragonato ad altri metodi già esistenti attraverso il confronto degli errori. Nel capitolo 6 si ha l'applicazione allo studio della produzione dei rifiuti nella provincia di Venezia e infine, nel capitolo 7, sono raccolte le conclusioni e i possibili sviluppi futuri.

# CAPITOLO 2

---

## Modello di regressione spazio-temporale con regolarizzazioni differenziali

---

In questo capitolo è descritto nel dettaglio il modello ST-PDE per l'analisi di dati distribuiti in spazio e tempo ed è calcolata la soluzione al problema di stima.

### 2.1 Caso senza covariate

#### 2.1.1 Dati e modello

Sia  $\{\mathbf{p}_i = (x_i, y_i); i = 1, \dots, n\}$  un insieme di  $n$  punti spaziali in un dominio limitato  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  e sia  $\{t_j; j = 1, \dots, m\}$  un insieme di  $m$  istanti temporali in un intervallo  $[T_1, T_2] \subset \mathbb{R}$ . In questi punti ed istanti si osservano i dati: siano quindi  $\{z_{ij}; i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m\}$  i valori della variabile risposta nel punto  $\mathbf{p}_i$  al tempo  $t_j$ . Si ipotizza che le osservazioni  $z_{ij}$  siano generate da un campo spazio-temporale con l'aggiunta di rumore:

$$z_{ij} = f(\mathbf{p}_i, t_j) + \varepsilon_{ij} \quad i = 1, \dots, n \quad j = 1, \dots, m , \quad (2.1)$$

dove  $\{\varepsilon_{ij}; i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m\}$  sono residui indipendenti identicamente distribuiti di media nulla e varianza  $\sigma^2$ . L'obiettivo del modello ST-PDE sarà la stima della funzione  $f(\mathbf{p}, t)$  dalle  $nm$  osservazioni a disposizione, minimizzando un funzionale  $J_\lambda(f(\mathbf{p}, t))$  con la somma degli scarti quadratici tra le osservazioni e valori stimati e termini di penalizzazione delle derivate per la regolarità della funzione.

### 2.1.2 Definizione delle funzioni di base

Dall'analisi della letteratura già disponibile per modelli simili, anche se solo spaziali, si può dedurre che non è possibile dare una stima della funzione se essa non risulta espressa in un'espansione di opportune funzioni di base. Infatti l'infinita possibilità di variazione di una funzione in un qualsiasi spazio funzionale non renderebbe possibile una stima computazionale del risultato. L'approccio scelto per la costruzione di  $f(\mathbf{p}, t)$  si basa sulla separabilità del modello in spazio e tempo e sull'implementazione con basi separabili. Siano

$$\{\varphi_k(t); k = 1, \dots, M\}$$

un insieme di  $M$  funzioni di base definite sull'intervallo temporale  $[T_1, T_2]$  e

$$\{\psi_l(\mathbf{p}); l = 1, \dots, N\}$$

in insieme di  $N$  funzioni di base definite sul dominio spaziale  $\Omega$ . Con le combinazioni lineari

$$\sum_{k=1}^M a_k \varphi_k(t) \quad \sum_{l=1}^N b_l \psi_l(\mathbf{p})$$

è possibile costruire, rispettivamente, funzioni varianti soltanto in tempo e in spazio. La funzione  $f(\mathbf{p}, t)$  nasce ipotizzando che i coefficienti costanti delle espansioni in base precedenti possano variare secondo la variabile che non è espressa dalle funzioni di base come segue:

$$f(\mathbf{p}, t) = \sum_{k=1}^M a_k(\mathbf{p}) \varphi_k(t) \quad (2.2)$$

$$= \sum_{l=1}^N b_l(t) \psi_l(\mathbf{p}) \quad (2.3)$$

$$= \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^M c_{lk} \psi_l(\mathbf{p}) \varphi_k(t) . \quad (2.4)$$

Si ha quindi che  $\{a_k(\mathbf{p}); k = 1, \dots, M\}$  sono i coefficienti spazio-varianti dell'espansione in basi di temporali e  $\{b_l(t); l = 1, \dots, N\}$  sono i coefficienti tempo-varianti dell'espansione in basi spaziali, a loro volta esprimibili come espansione di funzioni di base:

$$a_k(\mathbf{p}) = \sum_{l=1}^N c_{lk} \psi_l(\mathbf{p}) \quad b_l(t) = \sum_{k=1}^M c_{lk} \varphi_k(t) .$$

Pertanto, il campo spazio-temporale  $f(\mathbf{p}, t)$  è la combinazione lineare di tutti i possibili prodotti incrociati tra le basi in spazio e le basi in tempo.

### 2.1.3 Funzionale di penalizzazione

Per poter stimare  $f(\mathbf{p}, t)$  si introduce la minimizzazione di un funzionale formato non solamente dagli scarti quadratici tra le osservazioni e le stime negli  $nm$  punti disponibili, ma anche da altri due termini, che derivano dalla penalizzazione di opportune derivate in spazio e tempo per poter garantire regolarità alla funzione. Analogamente a quanto fatto il sez. 2.1.2, per costruire tale funzionale si considerano innanzitutto i problemi marginali in spazio e tempo.

Per garantire una buona regolarità spaziale alla funzione è necessario penalizzare il quadrato della norma  $L^2$  del laplaciano (dove per laplaciano si intenderà, da ora in avanti, rispetto alle variabili in spazio  $\mathbf{p}$ ). La stessa scelta è stata fatta in altre pubblicazioni come [18], [19] e [27]. Quindi se  $g(\mathbf{p}) : \Omega \mapsto \mathbb{R}$  è una funzione spazio-variante, allora si può definire la penalizzazione della regolarità in spazio tramite:

$$J_S(g(\mathbf{p})) = \int_{\Omega} \left( \Delta g(\mathbf{p}) \right)^2 d\mathbf{p} .$$

Analogamente in tempo si avrà la penalizzazione del quadrato della norma  $L^2$  della derivata seconda (come fatto ad esempio in [16]). Se  $h(t) : [T_1, T_2] \mapsto \mathbb{R}$ , allora si avrà

$$J_T(h(t)) = \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 h(t)}{\partial t^2} \right)^2 dt .$$

Grazie alle ipotesi di regolarità introdotte in sez. 2.1.2 tali penalizzazioni possono essere applicate ai coefficienti degli sviluppi delle eq. (2.2) e (2.3) (in analogia a quanto fatto in [1] e [10]). Si ritrovano i seguenti termini per la regolarità delle derivate:

$$\sum_{k=1}^M J_S(a_k(\mathbf{p})) \quad \sum_{l=1}^N J_T(b_l(t))$$

che uniti al termine di scarti quadratici tra valori osservati e stimati, costituiscono il funzionale di penalizzazione di riferimento per questo modello:

$$\begin{aligned} J_{\lambda}(f(\mathbf{p}, t)) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (z_{ij} - f(\mathbf{p}_i, t_j))^2 + \\ &+ \lambda_S \sum_{k=1}^M \int_{\Omega} \left( \Delta(a_k(\mathbf{p})) \right)^2 d\mathbf{p} + \lambda_T \sum_{l=1}^N \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \right)^2 dt . \end{aligned} \quad (2.5)$$

I termini  $\lambda_S > 0$  e  $\lambda_T > 0$  sono i parametri di smoothing che stabiliscono il peso delle penalizzazioni rispettivamente in spazio e tempo. Se troppo alti, la funzione stimata tenderà ad essere quasi liscia e distante dai dati. Al-

contrario, se troppo bassi, la funzione stimata sarà l'interpolazione dei dati e per nulla liscia. Sebbene quest'ultimo caso possa sembrare molto buono poiché vicino ai valori osservati, non è ciò che si desidera, poiché crea una stima troppo dipendente dai dati e spesso con variazioni eccessivamente repentine. Un corretto bilanciamento di questi casi garantisce una buona descrizione del fenomeno. Pertanto, prima della stima della soluzione, sarà necessaria una analisi per la ricerca di buoni valori per  $\lambda_S$  e  $\lambda_T$ , come sarà descritto in sez. 2.3.

### 2.1.4 Modello ideale

Il funzionale di penalizzazione riportato in eq. (2.5) è il risultato di una costruzione derivante dalle penalizzazioni marginali in spazio e tempo, ma idealmente si può ricondurre al seguente:

$$\begin{aligned} \tilde{J}_\lambda(f) = & \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (z_{ij} - f(\mathbf{p}_i, t_j))^2 + \\ & + \lambda_S \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} (\Delta f(\mathbf{p}, t))^2 d\mathbf{p} dt + \lambda_T \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 f(\mathbf{p}, t)}{\partial t^2} \right)^2 dt d\mathbf{p}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

dove  $J_S$  e  $J_T$  sono applicati direttamente alla funzione  $f(\mathbf{p}, t)$  e sono integrati, rispettivamente, sull'intervallo temporale e sul dominio spaziale. Se si applica la forma di  $f(\mathbf{p}, t)$  dell'eq. (2.2) nel termine di penalizzazione del laplaciano in spazio, allora si può ritrovare:

$$\begin{aligned} \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} (\Delta f(\mathbf{p}, t))^2 d\mathbf{p} dt &= \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} \left( \Delta \left( \sum_{k=1}^M a_k(\mathbf{p}) \varphi_k(t) \right) \right)^2 d\mathbf{p} dt \\ &= \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} \left( \sum_{k=1}^M \Delta a_k(\mathbf{p}) \varphi_k(t) \right)^2 d\mathbf{p} dt \\ &= \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} \left( \sum_{k=1}^M \Delta a_k(\mathbf{p}) \varphi_k(t) \right) \left( \sum_{h=1}^M \Delta a_h(\mathbf{p}) \varphi_h(t) \right) d\mathbf{p} dt \\ &= \int_{T_1}^{T_2} \int_{\Omega} \left( \sum_{k=1}^M \sum_{h=1}^M \Delta a_k(\mathbf{p}) \Delta a_h(\mathbf{p}) \varphi_k(t) \varphi_h(t) \right) d\mathbf{p} dt \\ &= \sum_{k=1}^M \sum_{h=1}^M \int_{\Omega} \Delta a_k(\mathbf{p}) \Delta a_h(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \int_{T_1}^{T_2} \varphi_k(t) \varphi_h(t) dt. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Questo termine è equivalente a quello proposto in eq. (2.5) se le basi temporali sono ortonormali, poiché in tal caso l'ultimo integrale in eq. (2.7) vale 1 se  $k = h$  e 0 altrimenti.

Allo stesso modo, se si sostituisce la forma di  $f(\mathbf{p}, t)$  dell'eq. (2.3) nella penalizzazione ideale dell'eq. (2.6) si ottiene:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 f(\mathbf{p}, t)}{\partial t^2} \right)^2 dt d\mathbf{p} &= \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 \sum_{l=1}^N b_l(t) \psi_l(\mathbf{p})}{\partial t^2} \right)^2 dt d\mathbf{p} \\
 &= \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \psi_l(\mathbf{p}) \right)^2 dt d\mathbf{p} \\
 &= \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \sum_{l=1}^N \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \psi_l(\mathbf{p}) \right) \left( \sum_{h=1}^N \frac{\partial^2 b_h(t)}{\partial t^2} \psi_h(\mathbf{p}) \right) dt d\mathbf{p} \\
 &= \int_{\Omega} \int_{T_1}^{T_2} \left( \sum_{l=1}^N \sum_{h=1}^N \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \frac{\partial^2 b_h(t)}{\partial t^2} \psi_l(\mathbf{p}) \psi_h(\mathbf{p}) \right) dt d\mathbf{p} \\
 &= \sum_{l=1}^N \sum_{h=1}^N \int_{T_1}^{T_2} \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \frac{\partial^2 b_h(t)}{\partial t^2} dt \int_{\Omega} \psi_l(\mathbf{p}) \psi_h(\mathbf{p}) d\mathbf{p}.
 \end{aligned} \tag{2.8}$$

La stessa osservazione del caso precedente vale anche ora: se le basi in spazio sono ortonormali, si ritrova la penalizzazione proposta in eq. (2.5).

In questo lavoro di tesi, quindi, è proposto un modello che risulterà essere computazionalmente semplice ma non perfettamente equivalente a questo modello ideale. In generale le funzioni di base non sono ortonormali. Comunque, gli insiemi di basi che saranno adattati sono sparsi, cioè i termini  $\int_{T_1}^{T_2} \varphi_k(t) \varphi_h(t) dt$  e  $\int_{\Omega} \psi_l(\mathbf{p}) \psi_h(\mathbf{p}) d\mathbf{p}$  sono diversi da zero solo per poche coppie di indici  $(k, h)$  e  $(l, h)$  rispettivamente.

### 2.1.5 Discretizzazione dei termini di penalizzazione

Così come è scritto in eq. (2.5), il funzionale  $J_{\lambda}(f(\mathbf{p}, t))$  non è ancora adatto ad essere trattato computazionalmente. Per poter avere una forma che renda semplice la stima i termini di penalizzazione di  $J_{\lambda}(f(\mathbf{p}, t))$  saranno nuovamente discretizzati.

Il primo caso da trattare è l'integrale del laplaciano dei coefficienti spazio-varianti dell'eq. (2.2) (un approccio analogo è descritto in [19]). Fissato  $k$ , l'integrale

$$\int_{\Omega} (\Delta(a_k(\mathbf{p})))^2 d\mathbf{p} \tag{2.9}$$

può essere semplificato introducendo la funzione  $g_k(\mathbf{p}) \in L^2(\Omega)$  come segue:

$$\int_{\Omega} g_k(\mathbf{p}) v(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = \int_{\Omega} \Delta(a_k(\mathbf{p})) v(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad \forall v(\mathbf{p}) \in L^2(\Omega). \tag{2.10}$$

Non è difficile verificare che, se  $g_k(\mathbf{p})$  rispetta l'equazione precedente con  $v$  arbitraria, allora:

$$\int_{\Omega} \left( \Delta(a_k(\mathbf{p})) \right)^2 d\mathbf{p} = \int_{\Omega} \Delta(a_k(\mathbf{p})) g_k(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (2.11)$$

Applicando la formula di Green e imponendo in maniera naturale le condizioni di Neumann alla frontiera di  $\Omega$  per  $a_k(\mathbf{p})$  (altre condizioni sono possibili, si veda [19]), si possono semplificare gli integrali:

$$\int_{\Omega} \Delta(a_k(\mathbf{p})) g_k(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = - \int_{\Omega} \nabla a_k(\mathbf{p}) \nabla g_k(\mathbf{p}) d\mathbf{p} \quad (2.12)$$

$$\int_{\Omega} \Delta(a_k(\mathbf{p})) v(\mathbf{p}) d\mathbf{p} = - \int_{\Omega} \nabla a_k(\mathbf{p}) \nabla v(\mathbf{p}) d\mathbf{p}. \quad (2.13)$$

Per poter calcolare analiticamente questi integrali è necessario introdurre l'uso delle basi spaziali  $\{\psi_l(\mathbf{p}); l = 1, \dots, N\}$  per le funzioni per  $g_k$  e  $v$ . Siano quindi:

$$g_k(\mathbf{p}) = \sum_{l=1}^N g_{lk} \psi_l(\mathbf{p}) \quad v(\mathbf{p}) = \sum_{l=1}^N v_l \psi_l(\mathbf{p}).$$

Per semplificare le notazioni saranno usati i vettori:

$$\mathbf{c}_k = \begin{bmatrix} c_{1k} \\ c_{2k} \\ \vdots \\ c_{Nk} \end{bmatrix} \quad \mathbf{g}_k = \begin{bmatrix} g_{1k} \\ g_{2k} \\ \vdots \\ g_{Nk} \end{bmatrix} \quad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}$$

e i seguenti per le funzioni di base e le loro derivate parziali:

$$\boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\psi}_x = \begin{bmatrix} \partial \psi_1 / \partial x \\ \partial \psi_2 / \partial x \\ \vdots \\ \partial \psi_N / \partial x \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\psi}_y = \begin{bmatrix} \partial \psi_1 / \partial y \\ \partial \psi_2 / \partial y \\ \vdots \\ \partial \psi_N / \partial y \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Mediante l'uso delle funzioni di base e di ciò che è stato ottenuto dall'applicazione della formula di Green, le relazioni (2.10) e (2.11) diventano:

$$g_k \left( \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{\psi}^T d\mathbf{p} \right) \mathbf{v} = -\mathbf{c}_k \left( \int_{\Omega} (\boldsymbol{\psi}_x \boldsymbol{\psi}_x^T + \boldsymbol{\psi}_y \boldsymbol{\psi}_y^T) d\mathbf{p} \right) \mathbf{v} \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$$

$$\int_{\Omega} \left( \Delta(a_k(\mathbf{p})) \right)^2 d\mathbf{p} = -\mathbf{c}_k \left( \int_{\Omega} (\boldsymbol{\psi}_x \boldsymbol{\psi}_x^T + \boldsymbol{\psi}_y \boldsymbol{\psi}_y^T) d\mathbf{p} \right) \mathbf{g}_k .$$

Quindi, se si introducono le matrici (analogamente a quanto fatto in [19])

$$R_0 = \int_{\Omega} \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{\psi}^T d\mathbf{p}$$

$$R_1 = \int_{\Omega} (\boldsymbol{\psi}_x \boldsymbol{\psi}_x^T + \boldsymbol{\psi}_y \boldsymbol{\psi}_y^T) d\mathbf{p} ,$$

si trova, per l'arbitrarietà di  $\mathbf{v}$ :

$$\int_{\Omega} \left( \Delta(a_k(\mathbf{p})) \right)^2 d\mathbf{p} = \mathbf{c}_k^T R_1 R_0^{-1} R_1 \mathbf{c}_k = \mathbf{c}_k^T P_S \mathbf{c}_k \quad (2.15)$$

Si noti che la matrice  $P_S$  non dipende da  $k$ , pertanto è la stessa per tutte le funzioni  $a_k(\mathbf{p})$ . Inoltre è simmetrica, poiché  $R_0$  e  $R_1$  lo sono. Anziché usare per la penalizzazione in spazio una discretizzazione che proviene direttamente dall'eq. (2.9), è stata ricavata una forma che, attraverso l'uso delle eq. (2.12) e (2.13), contiene soltanto derivate prime della funzione di base. Grazie a questa forma e all'uso della matrice  $P_S$  sarà possibile adottare basi in spazio non necessariamente in  $H^2(\Omega)$ , come gli elementi finiti lineari, aumentando l'efficienza del calcolo computazionale della stima.

Non resta altro che discretizzare anche  $\int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \right)^2 dt$ . Dopo aver introdotto l'uso delle funzioni di base, se si definisce

$$P_T = \begin{bmatrix} \int_{T_1}^{T_2} \varphi_1''(t) \varphi_1''(t) dt & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_1''(t) \varphi_2''(t) dt & \dots & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_1''(t) \varphi_M''(t) dt \\ \int_{T_1}^{T_2} \varphi_2''(t) \varphi_1''(t) dt & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_2''(t) \varphi_2''(t) dt & \dots & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_2''(t) \varphi_M''(t) dt \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \int_{T_1}^{T_2} \varphi_M''(t) \varphi_1''(t) dt & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_M''(t) \varphi_2''(t) dt & \dots & \int_{T_1}^{T_2} \varphi_M''(t) \varphi_M''(t) dt \end{bmatrix}$$

e il vettore

$$\mathbf{c}_l = \begin{bmatrix} c_{l1} \\ c_{l2} \\ \dots \\ c_{lM} \end{bmatrix} ,$$

si ritrova:

$$\int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \right)^2 dt = \mathbf{c}_l^T P_T \mathbf{c}_l .$$

Anche la matrice  $P_T$  è simmetrica.

Tramite l'uso delle matrici  $P_S$  e  $P_T$ , la parte di penalizzazione per la regolarizzazione di  $f$  in eq. (2.5) è rappresentabile con un'unica forma

quadratica. Per mostrarlo, si introduce il vettore

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_{11} \\ \vdots \\ c_{1M} \\ c_{21} \\ \vdots \\ c_{2M} \\ \vdots \\ c_{NM} \end{bmatrix}$$

e la matrice  $P$ , definita con opportuni prodotti di Kronecker come segue:

$$P = \lambda_S (P_S \otimes I_M) + \lambda_T (I_N \otimes P_T),$$

dove  $I_M$  and  $I_N$  sono matrici identità di dimensioni  $M \times M$  e  $N \times N$  rispettivamente. Allora si avrà:

$$\begin{aligned} \lambda_S \sum_{k=1}^M \int_{\Omega} (\Delta(a_k(\mathbf{p})))^2 d\mathbf{p} + \lambda_T \sum_{l=1}^N \int_{T_1}^{T_2} \left( \frac{\partial^2 b_l(t)}{\partial t^2} \right)^2 dt &= \\ &= \lambda_S \sum_{k=1}^M \mathbf{c}_k^T P_S \mathbf{c}_k + \lambda_T \sum_{l=1}^N \mathbf{c}_l^T P_T \mathbf{c}_l = \mathbf{c}^T P \mathbf{c}. \quad (2.16) \end{aligned}$$

A causa della simmetria dei termini con cui è costruita, anche la matrice  $P$  è simmetrica.

### 2.1.6 Soluzione del problema di stima

Grazie a quanto ricavato nel paragrafo precedente, la parte di penalizzazione delle derivate del funzionale  $J_\lambda(f(\mathbf{p}, t))$  si è ridotta ad un'unica forma quadratica. Per trovare una stima della soluzione, però, occorre scrivere in forma matriciale anche il termine con gli scarti quadratici tra valori osservati e valori stimati dal modello. Siano definiti il vettore dei valori osservati

$$\mathbf{z} = \begin{bmatrix} z_{11} \\ \vdots \\ z_{1m} \\ z_{21} \\ \vdots \\ z_{2m} \\ \vdots \\ z_{nm} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

e le matrici  $\Psi$  (con le valutazioni delle basi spaziali nei punti  $\{\mathbf{p}_i; i = 1, \dots, n\}$ ) e  $\Phi$  (con le valutazioni delle basi temporali  $\{t_j; j = 1, \dots, m\}$ ):

$$\Psi = \begin{bmatrix} \psi_1(\mathbf{p}_1) & \psi_2(\mathbf{p}_1) & \dots & \psi_N(\mathbf{p}_1) \\ \psi_1(\mathbf{p}_2) & \psi_2(\mathbf{p}_2) & \dots & \psi_N(\mathbf{p}_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \psi_1(\mathbf{p}_n) & \psi_2(\mathbf{p}_n) & \dots & \psi_N(\mathbf{p}_n) \end{bmatrix}$$

$$\Phi = \begin{bmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & \varphi_M(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & \varphi_M(t_2) \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \varphi_1(t_m) & \varphi_2(t_m) & \dots & \varphi_M(t_m) \end{bmatrix}.$$

Le ultime due matrici non sono utili da sole, ma moltiplicate tra loro con prodotto di Kronecker, poiché se

$$B = \Psi \otimes \Phi,$$

allora si può facilmente dire che:

$$\begin{bmatrix} f(\mathbf{p}_1, t_1) \\ \vdots \\ f(\mathbf{p}_1, t_m) \\ f(\mathbf{p}_2, t_1) \\ \vdots \\ f(\mathbf{p}_2, t_m) \\ \vdots \\ f(\mathbf{p}_n, t_m) \end{bmatrix} = B\mathbf{c}.$$

Quindi è possibile dare una forma definitiva al funzionale di penalizzazione:

$$J_\lambda(\mathbf{c}) = (\mathbf{z} - B\mathbf{c})^T(\mathbf{z} - B\mathbf{c}) + \mathbf{c}^T P \mathbf{c}, \quad (2.18)$$

e per trovare la stima  $\hat{f}(\mathbf{p}, t)$  sarà sufficiente ricavare il vettore dei coefficienti  $\mathbf{c}$  risolvendo il problema di minimo:

$$\hat{\mathbf{c}} = \arg \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{R}^{NM}} J_\lambda(\mathbf{c}).$$

Basta derivare la formulazione ottenuta in eq. (2.18) per ottenere la soluzione al problema di stima. Grazie alla simmetria di  $P$ , si ha:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} J = -2B^T \mathbf{z} + 2(B^T B + P)\mathbf{c},$$

che posta uguale a zero porta all'equazione

$$(B^T B + P)\hat{\mathbf{c}} = B^T \mathbf{z}$$

e in conclusione

$$\hat{\boldsymbol{c}} = (B^T B + P)^{-1} B^T \mathbf{z}. \quad (2.19)$$

La forma ritrovata per la stima ricorda i modelli di regressione penalizzata. La soluzione si può ricavare risolvendo un sistema lineare, seppur di grandi dimensioni (la matrice  $B^T B + P$  ha dimensioni  $NM \times NM$  e già con le prime simulazioni si avranno dimensioni elevate).

L'ultimo elemento da definire è la *smoothing matrix*  $S$ , che permette di derivare i valori stimati dal modello direttamente da quelli osservati:

$$\hat{\mathbf{z}} = B\hat{\boldsymbol{c}} = B(B^T B + P)^{-1} B^T \mathbf{z} = S\mathbf{z}.$$

### 2.1.7 Proprietà statistiche dello stimatore

Il modello di partenza indicato in eq. (2.1) può essere scritto anche in forma matriciale (del tutto simile a quella della regressione lineare)

$$\mathbf{z} = B\boldsymbol{c} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.20)$$

A causa delle proprietà statistiche di  $\boldsymbol{\varepsilon}$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0} \quad \text{Var}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 I_{nm}$$

si ha

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}] = B\boldsymbol{c} \quad \text{Var}[\mathbf{z}] = \sigma^2 I_{nm}$$

e quindi è immediato ricavare per lo stimatore  $\hat{\boldsymbol{c}}$  (grazie alle proprietà simmetria di  $P$ ):

$$\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{c}}] = (B^T B + P)^{-1} B^T B \boldsymbol{c} \quad \text{Var}[\hat{\boldsymbol{c}}] = \sigma^2 (B^T B + P)^{-1} B^T B (B^T B + P)^{-1}.$$

Non è stata ipotizzata la gaussianità per  $\boldsymbol{\varepsilon}$ , ma se così fosse anche  $\hat{\boldsymbol{c}}$  sarebbe gaussiano. Grazie a quanto appena ricavato è possibile elaborare (con una data significatività) una regione di confidenza per  $\hat{\boldsymbol{c}}$  o intervalli di confidenza puntuali per la funzione stimata.

## 2.2 Caso con covariate

Il modello si estende facilmente se si prevede che il dato possa essere influenzato da covariate. La forma in eq. (2.1) diventa:

$$\mathbf{z}_{ij} = \mathbf{w}_{ij}^T \boldsymbol{\beta} + f(\mathbf{p}_i, t_j) + \varepsilon_{ij} \quad i = 1, \dots, n \quad j = 1, \dots, m, \quad (2.21)$$

dove  $\mathbf{w}_{ij}$  è il vettore delle  $p$  covariate associate a  $\mathbf{z}_{ij}$  e  $\boldsymbol{\beta}$  è il vettore dei coefficienti di regressione. Di conseguenza il funzionale discreto di eq. (2.18) diventa:

$$J_\lambda(\boldsymbol{c}) = (\mathbf{z} - W\boldsymbol{\beta} - B\boldsymbol{c})^T (\mathbf{z} - W\boldsymbol{\beta} - B\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{c}^T S \boldsymbol{c},$$

dove  $W$  è la matrice  $nm \times p$  con i vettori  $\{\mathbf{w}_{ij}; i = 1, \dots, n; j = 1, \dots, m\}$ .

Per trovare la soluzione occorre derivare questa espressione rispetto a  $\beta$  e  $c$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \beta} J &= -2W^T \mathbf{z} + 2W^T B c + 2W^T W \hat{\beta}, \\ \frac{\partial}{\partial c} J &= -2B^T \mathbf{z} + 2B^T W \hat{\beta} + 2(B^T B + P)c.\end{aligned}$$

Imponendo che le derivate siano uguali a zero si ha:

$$\begin{cases} W^T W \hat{\beta} = W^T (\mathbf{z} - B \hat{c}) \\ (B^T B + P) \hat{c} = B^T (\mathbf{z} - W \hat{\beta}) \end{cases}.$$

Queste due equazioni ricordano quelle usate per la regressione lineare e per il modello senza covariate, con la differenza che in questo caso a  $\mathbf{z}$  è sottratta, in entrambi i casi, la parte spiegata dal termine di modello a cui non si riferiscono  $\hat{\beta}$  e  $\hat{c}$  rispettivamente.

A questo punto si possono ricavare le stime dei parametri. Per i coefficienti della funzione si trova:

$$\begin{aligned}\hat{c} &= [B^T B - B^T W (W^T W)^{-1} W^T B + P]^{-1} B^T [I - W (W^T W)^{-1} W^T] \mathbf{z} \\ &= A Q \mathbf{z}\end{aligned}\tag{2.22}$$

con

$$Q = [I - W (W^T W)^{-1} W^T]$$

e

$$A = [B^T B - B^T W (W^T W)^{-1} W^T B + P]^{-1} B^T = [B^T Q B + P]^{-1} B^T$$

La matrice  $Q$  proietta sul sottospazio ortogonale allo spazio generato dalle colonne della matrice disegno. La si ritrova anche nella regressione lineare, dove è utilizzata per ricavare il vettore dei residui da quello dei dati. Sono valide le seguenti proprietà:

- $Q$  è idempotente, cioè  $QQ = Q$ ;
- $Q$  è simmetrica;
- a causa del fatto che proietta nel sottospazio ortogonale di  $\text{Col}(W)$ ,  $QW$  risulta essere la matrice nulla di opportune dimensioni.

Infine, la stima di  $\hat{\beta}$  si ottiene dalla stima ottenuta per  $\hat{c}$ :

$$\hat{\beta} = (W^T W)^{-1} W^T (I - BAQ) \mathbf{z}\tag{2.23}$$

In modo analogo al caso senza covariate, è necessario ricavare la *smoothing matrix*, poiché sarà utile in seguito:

$$\hat{\mathbf{z}} = B \hat{c} + W \hat{\beta} = [BAQ + W(W^T W)^{-1} W^T (I - BAQ)] \mathbf{z} = S \mathbf{z}.$$

### 2.2.1 Proprietà statistiche degli stimatori

Anche in questo caso è possibile calcolare valore atteso e varianza degli stimatori ottenuti. Questo è particolarmente utile in presenza di covariate, poiché consente di calcolare intervalli per verificarne la significatività. Per farlo, però, è necessario avere la forma matriciale del modello indicato in eq. (2.21):

$$\mathbf{z} = \mathbf{B}\mathbf{c} + \mathbf{W}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.24)$$

Di nuovo si ha

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \mathbf{0} \quad \text{Var}[\boldsymbol{\varepsilon}] = \sigma^2 I_{nm}$$

e di conseguenza

$$\mathbb{E}[\mathbf{z}] = \mathbf{B}\mathbf{c} + \mathbf{W}\boldsymbol{\beta} \quad \text{Var}[\mathbf{z}] = \sigma^2 I_{nm}.$$

Mediate questo risultato e le proprietà ricavate per la matrice  $Q$  è possibile ottenere che:

$$\mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = \mathbf{A}\mathbf{Q}\mathbf{B}\mathbf{c} \quad \text{Var}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] = \sigma^2 \mathbf{A}\mathbf{Q}\mathbf{A}^T.$$

Per  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  i calcoli sono più complessi, ma si semplificano grazie alle proprietà indicate in precedenza per la matrice  $Q$ . Si ritrova:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] &= \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T(\mathbf{I} - \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{Q})\mathbf{B}\mathbf{c} \\ \text{Var}[\hat{\boldsymbol{\beta}}] &= \sigma^2(\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1} + \sigma^2(\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{Q}\mathbf{A}^T\mathbf{B}^T\mathbf{W}(\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}. \end{aligned}$$

Come nel caso senza covariate, anche ora si avrebbe la gaussianità degli stimatori se fosse ipotizzata per  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Lo stimatore per  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  è distorto.

## 2.3 Stima della varianza di modello e scelta dei parametri di smoothing

Quanto riportato di seguito è valido indipendentemente dal fatto che siano inserite nel modello le covariate o no, quindi per entrambi i modelli proposti in precedenza.

### 2.3.1 Varianza di modello

Stimare la varianza dell'errore è necessario se si vuole fare inferenza sugli stimatori ed è molto semplice se si conoscono i gradi di libertà equivalenti del modello (EDF). Questi si ricavano dalla *smoothing matrix*:

$$\text{EDF} = \text{tr}(S).$$

Con questo valore si calcola la stima della varianza, usando i residui e il numero totale di dati:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{nm - \text{tr}(S)}(\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})^T(\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})$$

### 2.3.2 Parametri di smoothing

I parametri  $\lambda_S$  e  $\lambda_T$  hanno un ruolo rilevante nella stima della soluzione, poiché scelgono quanto peso dare alla regolarità della funzione in spazio e tempo. Quindi è opportuno che siano fissati accuratamente prima della stima della soluzione.

Secondo quanto indicato in [5] e in [10], la scelta corretta si ha con il valore di  $\lambda$  che realizza il minimo dell'indice di *generalized cross validation*

$$\text{GCV}(\lambda) = \frac{nm}{nm - \text{tr}(S)} D(\hat{\epsilon}, \hat{\beta}) ,$$

dove  $D$  è la devianza del modello. Essa è così definita:

$$D(\hat{\epsilon}, \hat{\beta}) = 2\sigma^2(l_{\text{sat}} - l(\hat{\epsilon}, \hat{\beta})) ,$$

dove  $l$  è la log-verosimiglianza del modello, che si ipotizza gaussiano, valutata rispettivamente nel suo massimo (valore di saturazione  $l_{\text{sat}}$ ) e in corrispondenza dei valori stimati ( $l(\hat{\epsilon}, \hat{\beta})$ ). Non è difficile dimostrare che, sia nel caso con covariate che senza covariate, si ha:

$$D(\hat{\epsilon}, \hat{\beta}) = (\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})^T (\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})$$

Di conseguenza, il miglior  $\lambda$  può essere scelto come valore che minimizza

$$\text{GCV}(\lambda) = \frac{nm}{nm - \text{tr}(S)} (\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}})^T (\mathbf{z} - \hat{\mathbf{z}}) . \quad (2.25)$$



# CAPITOLO 3

---

## Sviluppo del codice R

---

Il modello descritto nel capitolo precedente è stato associato ad un algoritmo e ha portato allo sviluppo di un codice R per l’analisi dei dati. In questo capitolo saranno spiegate alcune delle scelte adottate o imposte durante la fase di sviluppo computazionale.

Il linguaggio di programmazione adottato è R ([15]). Questa decisione ha permesso di sfruttare le numerose funzioni statistiche che in altri linguaggi non sarebbero disponibili. Tuttavia, come si potrà notare in seguito, sono anche emersi i lati negativi di questo linguaggio. Durante l’implementazione si è fatto uso del pacchetto *fda* (analizzato in [17]) e di alcune funzioni già disponibili per il caso puramente spaziale descritto in [19].

### 3.1 Funzioni di base considerate

Sono stati implementati solo alcuni tipi di funzioni di base in spazio e tempo, che si sono rivelati utili alle applicazioni che saranno riportate nei capitoli successivi.

Per quanto riguarda lo spazio, il codice è stato pensato per dati distribuiti su un dominio dalla complessa definizione (con bordi irregolari o buchi). Quindi un’ottima scelta di funzioni di base sono gli elementi finiti (descritti ad esempio in [14]) analogamente a quanto fatto in [19]. Queste funzioni sono definite su  $\Omega_\tau$ , triangolazione di Delaunay del dominio  $\Omega$ , costruita con i vertici del poligono che descrive la frontiera e con i punti interni (punti in cui sono disponibili i dati e, nel caso della provincia di Venezia, punti aggiuntivi per il vincolo dell’area massima per i triangoli). Ognuno di questi punti diventa un nodo della triangolazione e ad ogni

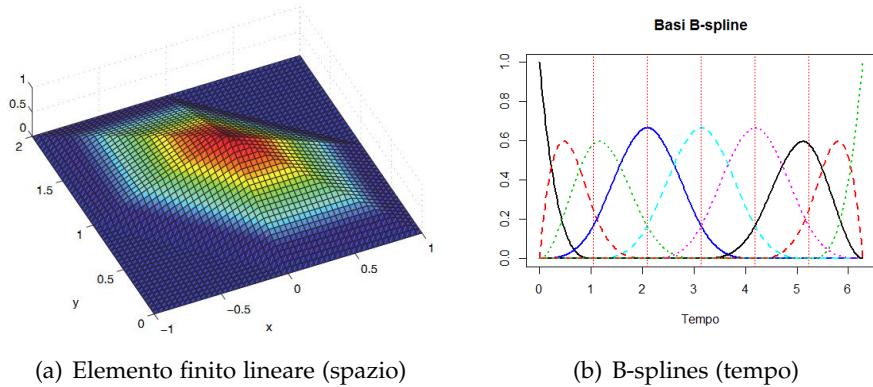


Figura 3.1: Funzioni di base implementate nel codice

nodo è associata una funzione lineare a tratti come quella in fig. 3.1(a), che vale 1 sul nodo selezionato, decresce linearmente sui triangoli adiacenti e si annulla su tutti gli altri nodi e triangoli. Per l'implementazione di queste funzioni è stata riutilizzata una parte del codice del caso puramente spaziale. Anche gli elementi finiti quadratici sono stati implementati, ma non sono stati scelti nelle applicazioni poiché rallentano l'esecuzione a causa della maggior costo computazionale che richiedono.

Le basi in tempo scelte per queste analisi sono le B-splines (esposte ad esempio in [16]), funzioni che, fissato un intervallo temporale e alcuni nodi in esso contenuti (nel nostro caso equispaziati), sono usate per l'espansione in base delle *funzioni spline* (funzioni polinomiali a tratti con condizioni di continuità e di derivata continua). Il codice necessario è già stato implementato ed ottimizzato nel pacchetto *fda* ed è stato riciclato per il codice del modello ST-PDE. In fig. 3.1(b) sono riportate le 9 B-splines cubiche definite sull'intervallo  $[0, 2\pi]$  (che sarà usato per l'applicazione al dominio a forma di C). L'unico vincolo imposto a queste funzioni di base è il grado, che deve essere almeno 3 per avere la derivata seconda delle basi necessaria per la penalizzazione.

### 3.2 Schematizzazione dell'algoritmo di stima

L'esecuzione del codice è stata divisa in alcuni passi per poter permettere all'utente di inserire gradualmente gli oggetti in ingresso e fissare i parametri che servono per ottenere la stima finale. In più punti si è cercato di nascondere all'utente le variabili temporanee e di includere in opportune classi di R tutte le informazioni riguardanti concetti tra di loro comuni.

Innanzitutto si ha l'acquisizione dei dati (e delle eventuali covariate) e la creazione della triangolazione. In questo caso non sono state imple-

mentate funzioni apposite poiché ci sono già pacchetti specializzati (nelle applicazioni che saranno presentate in seguito si è fatto uso del pacchetto *RTriangle* descritto in [20] per la triangolazione).

Dopo aver definito i punti, la triangolazione e gli istanti di tempo occorre fissare le funzioni di base. Sono state implementate due funzioni di R, una per lo spazio e una per il tempo, che in base ai parametri in ingresso e agli ordini scelti per le funzioni di base creano appositi oggetti che memorizzano tutte le informazioni necessarie.

A questo punto si ha la ricerca dei migliori parametri di smoothing. In queste analisi  $\lambda_S$  e  $\lambda_T$  saranno sempre espressi in potenze di 10. Per trovare dei buoni valori per i parametri si eseguono più tentativi, creando due insiemi discreti di variazione per  $\log_{10} \lambda_S$  e  $\log_{10} \lambda_T$  e minimizzando l'indice in eq. (2.25) sui  $\lambda$  corrispondenti al prodotto cartesiano tra di essi. Il procedimento viene ripetuto qualche volta rendendo la griglia sempre più fitta e centrata sul punto di minimo ottenuto nell'iterazione precedente. Sono state implementate due funzioni, una per il caso senza covariate e una per il caso con covariate, a causa della diversità della *smoothing matrix*. Questo è il passaggio più lento dell'algoritmo.

Dopo aver fissato i parametri di smoothing si arriva al cuore dell'algoritmo, poiché è calcolata la stima della soluzione. Ciò che eseguono le apposite funzioni è calcolare tutte le matrici di passaggio ( $P$  e  $B$ ) nascondendole all'utente e risolvere gli appositi sistemi lineari (eq. (2.19), (2.22) e (2.23)). In uscita è restituito un oggetto che racchiude i vettori ricavati e le funzioni di base, in modo da poter immagazzinare insieme tutti gli elementi necessari per tracciare grafici riguardanti la soluzione.

Terminata la stima, ciò che resta da fare è analizzare i risultati. Sono state create più funzioni, da scegliere in base a quello che si vuole visualizzare: calcolo della soluzione in punti ed istanti scelti, plot della funzione ad un istante fissato o ad un punto spaziale fissato, calcolo degli intervalli di confidenza approssimati per le componenti di  $\beta$ .

### 3.3 Strutture dati adottate

Al momento dell'implementazione del codice corrispondente alle eq. (2.25), (2.19), (2.22) e (2.23) è stato necessario decidere la corretta struttura dati per le matrici e una buona tecnica di inversione. In generale, quando si studiano dati distribuiti in spazio e tempo su domini complessi, le dimensioni delle matrici da invertire per calcolare  $\hat{\beta}$  sono di grandi dimensioni. Inoltre, a causa delle funzioni di base scelte in precedenza, le matrici  $\Psi$ ,  $\Phi$ ,  $P_S$ ,  $R_0$  e  $R_1$  risulteranno sparse con molta facilità. Quindi la scelta di una struttura dati efficiente tra quelle disponibili in R è abbastanza delicata.

Sono stati analizzati quattro casi, in base al tipo di matrice o alla tecnica di inversione. Come tipi di matrice sono state provate le matrici base di

R o le matrici sparse del pacchetto *Matrix* (descritto in [2]). Il motivo della scelta delle matrici sparse non è dovuto soltanto al fatto che molte matrici hanno questa caratteristica (come già evidenziato in precedenza) ma anche all'eccessiva richiesta di memoria dell'algoritmo (particolarmente alta per le dimensioni delle matrici usate per la stima). Come tecnica di inversione sono state provate l'inversione classica di R (comando *solve*) o la fattorizzazione QR (moltiplicazione per la matrice Q trasposta e *backward substitutions* con la matrice R). Sono stati misurati i tempi di calcolo della stima con queste quattro modalità nell'applicazione del dominio a forma di C senza covariate (sarà discusso nel dettaglio nel prossimo capitolo) e in tab. 3.1 sono riportati i risultati. Sono stati eseguiti più tentativi, al variare del numero di punti interni del dominio (e quindi della dimensione della matrice da invertire in eq. (2.19)) per poter controllare la velocità di esecuzione a difficoltà crescente.

Dimensione	Classico	Classico+QR	Sparse	Sparse+QR
1446	11.89	15.33	31.48	1508.63
2124	36.68	46.04	141.11	
3672	211.32	248.36	1369.21	
7086	1592.88	1840.64		

Tabella 3.1: Tempo di calcolo della stima di  $\hat{c}$  (in secondi) nelle simulazioni eseguite sul dominio a forma di C

Non sono state eseguite più misurazioni per caso perché già da queste è chiaro quale sia la miglior scelta. L'uso delle matrici sparse è stato progressivamente abbandonato poiché nettamente più lento. Anche la fattorizzazione QR non ha portato ad un miglioramento, perciò è stato adottata l'inversione base di R.

Il motivo di questa lentezza è legato al linguaggio di programmazione. Non è una novità che R non sia uno dei linguaggi maggiormente efficienti. Inoltre, tra tutte le operazioni a disposizione, l'esecuzione dei cicli e di operazioni di accesso sono tra le più difficoltose. Quindi l'uso di fattorizzazione QR (e della risoluzione di un sistema tramite *backward substitutions* che richiede) o di matrici sparse (implementate tramite tre vettori rispettivamente con indici di riga, di colonna e valori non nulli) sono necessariamente lente per l'alto numero di cicli che richiedono. Le funzioni base di R, invece, sono certamente più ottimizzate. La conseguenza di questa analisi sarà riportata anche nel cap. 7, in cui si sottolinea che l'integrazione con linguaggi più efficienti porterebbe sicuramente a miglioramenti computazionali.

## CAPITOLO 4

---

### Studi di simulazione

---

Prima di applicare il modello ST-PDE all'analisi della produzione di rifiuti nella provincia di Venezia sono state eseguite simulazioni su un caso noto e più semplice. Si è scelto di analizzare il dominio a forma di C e la corrispondente funzione spaziale  $g(\mathbf{p})$  (riportata in fig. 4.1) descritti in [18], [19], [27] e implementati nel pacchetto R *mgcv*. La funzione  $g(\mathbf{p})$  è solo spaziale, quindi è stata introdotta una variazione temporale deformando con il coseno:

$$f(\mathbf{p}, t) = g(\mathbf{p}) \cos(t)$$

Su questo semplice caso sono stati eseguiti i primi tentativi per il modello ST-PDE sia senza covariate che con una covariata generata.

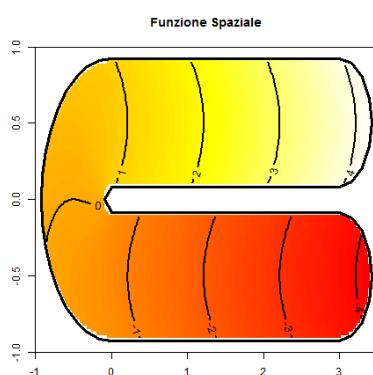


Figura 4.1: Funzione spaziale  $g(\mathbf{p})$

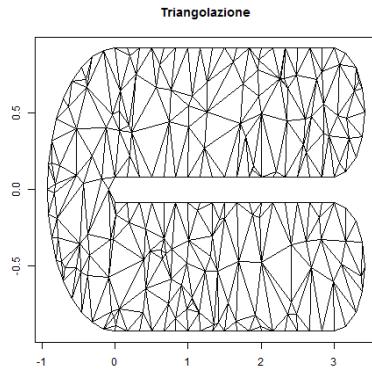


Figura 4.2: Triangolazione del dominio a forma di C

Dalla rappresentazione di  $g(p)$  si può notare come sia fondamentale la geometria del problema, come per il caso della produzione dei rifiuti nella provincia di Venezia. Infatti, i massimi e i minimi si trovano sulle estremità del dominio, tra di loro vicine ma non collegate se non attraverso tutto il dominio. Si ha una forte concavità che non può essere ignorata durante la stima.

## 4.1 Triangolazione e istanti temporali

In questo caso non sono presenti punti spaziali definiti dalla natura del problema (come possono essere i comuni per la provincia di Venezia), quindi è stato necessario ricavarli. Sono stati generati casualmente 150 punti all'interno del rettangolo  $[-1, +3.5] \times [-1, +1]$  e di questi sono stati considerati validi solo quelli che ricadevano all'interno del dominio. Non è stata usata la descrizione della frontiera presente in *mgcv*, ma una versione diversa che permette di avere punti anche nella parte rettilinea del bordo. In fig. 4.2 è riportata la triangolazione di Delaunay ottenuta grazie al pacchetto R *RTriangle*. Come basi in spazio sono stati usati gli elementi finiti lineari definiti su questa triangolazione. In tutti gli esempi che seguiranno sarà considerata questa descrizione del dominio, che è formata da 241 punti (pari anche al numero di basi spaziali  $N$ ). Di questi, 108 sono di frontiera e i restanti 133 corrispondono agli  $n$  punti sui quali saranno disponibili i dati.

Come intervallo temporale di variazione dei dati è stato scelto  $[0, 2\pi]$  per sfruttare la periodicità del coseno. All'interno di questo intervallo sono stati ricavati 9 istanti temporali equidistanti tra di loro, quindi uno ogni  $\frac{\pi}{4}$ . Sono state fissate come basi in tempo le B-splines cubiche. Il numero di basi  $M$  è uguale al numero di istanti temporali a disposizione  $m$ , quindi 9.

## 4.2 Caso senza covariata

Nei punti e negli istanti temporali disponibili i dati sono stati ricavati dalla funzione esatta con l'aggiunta del rumore:

$$z_{ij} = f(\mathbf{p}_i, t_j) + \varepsilon_{ij} \quad \forall i \in 1 \dots n, \forall j \in 1 \dots m$$

dove

$$\varepsilon_{ij} \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, 0.5^2) \quad \forall i \in 1 \dots n, \forall j \in 1 \dots m .$$

Per poter eseguire una analisi ottimale, come primo passo è necessario scegliere i valori dei parametri di smoothing ottimizzando l'indice GCV( $\lambda$ ) riportato in eq. (2.25). Questo passaggio è stato eseguito esattamente come riportato in sez. 3.2. Dopo alcune iterazioni, è stato fissato  $\lambda = (10^{-0.375}, 10^{-3.25})$  come valore definitivo per questa analisi ed è stata calcolata computazionalmente la stima.

In fig. 4.3 sono riportati i confronti tra funzione reale e stimata nei primi istanti di tempo (la scala di colori è stata resa uniforme tra tutti i grafici). Si può notare come la funzione stimata sia effettivamente molto simile a quella reale. La diversità tra le due estremità del dominio è stata colta, poiché il procedimento ha considerato correttamente la definizione della geometria spaziale.

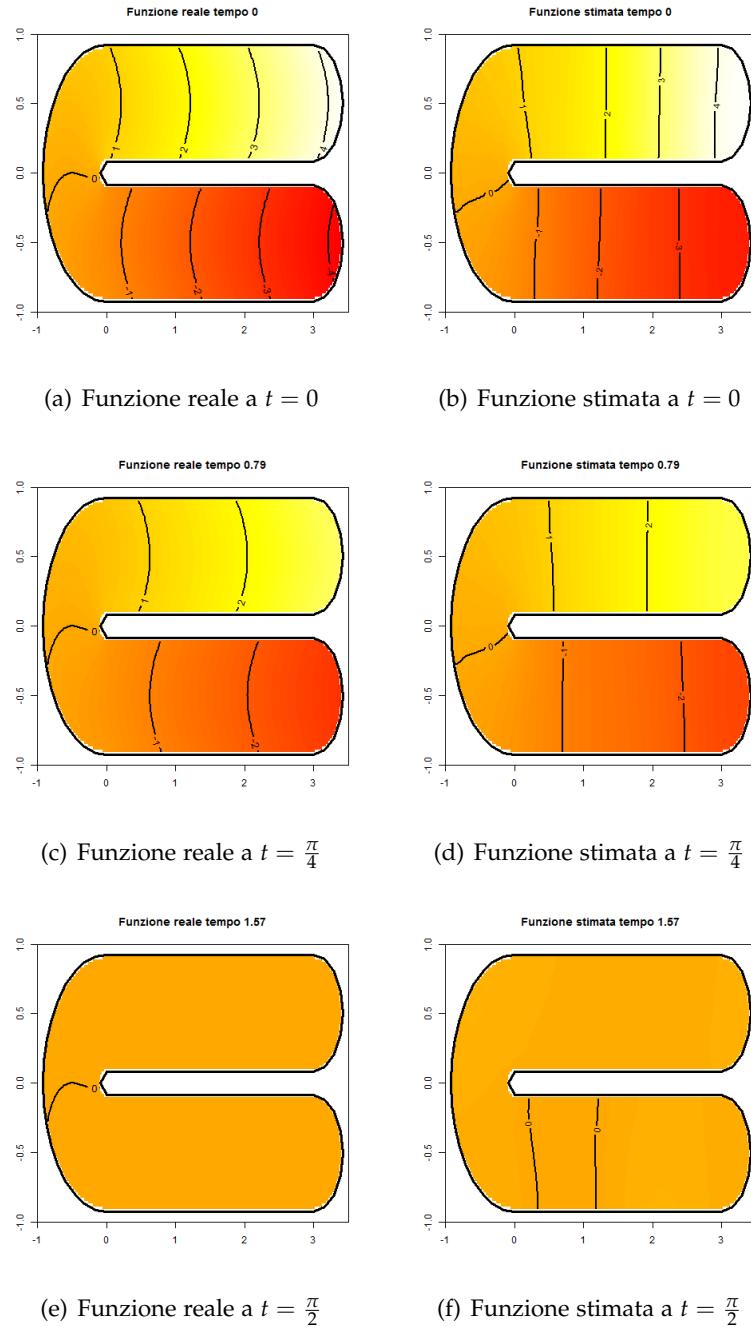


Figura 4.3: Stime della funzione  $f(p, t)$  ad alcuni istanti di tempo, caso senza covariata

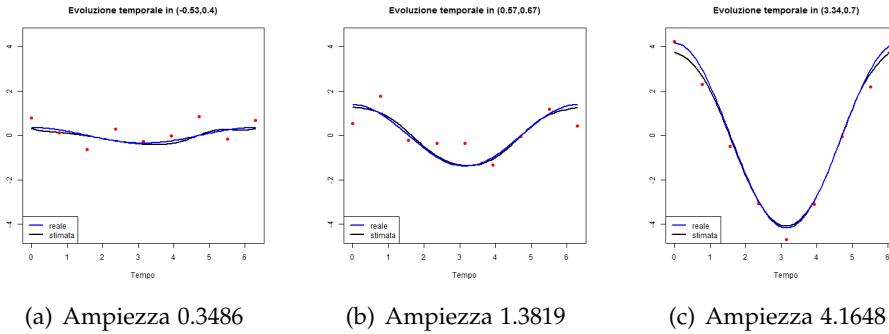


Figura 4.4: Evoluzione temporale in alcuni nodi della triangolazione, caso senza covariata

In fig. 4.4 si ha il confronto dell’evoluzione temporale in alcuni nodi della triangolazione. Oltre alla curva stimata, tracciata in nero, in questo caso in cui si ha perfetta conoscenza del fenomeno che genera i dati è possibile visualizzare anche la curva reale, tracciata in blu. Per come è stata costruita la funzione  $f(\mathbf{p}, t)$ , la curva reale sarà una cosinusoida di ampiezza nota (pari a  $g(\mathbf{p})$ ). Tale ampiezza è stata riportata con i grafici. I punti rossi corrispondono al dato generato (termine dovuto al rumore compreso). Tanto più è vicina a zero l’ampiezza della curva, tanto più il rumore influenza la stima poiché più rilevante (infatti, in fig. 4.3, le curve di livello della funzione stimata sono le più diverse da quelle reali quando la stima è vicina a zero). Tuttavia, anche nel caso di ampiezza vicina al valore minimo di  $g(\mathbf{p})$  in fig. 4.4(a) o nell’istante di tempo  $t = \frac{\pi}{2}$  in fig. 4.3, l’andamento del fenomeno è stato riconosciuto ed è stata ottenuta una buona stima.

### 4.3 Caso con covariata

Nel problema della stima della funzione  $f(\mathbf{p}, t)$  non sono presenti covariate. Quindi, per poter testare il modello anche in questo caso, è stato necessario generare valori da assumere come covariata in ogni punto spaziale ed istante temporale in cui si ha la risposta. In definitiva i dati sono così formati:

$$z_{ij} = f(\mathbf{p}_i, t_j) + \beta w_{ij} + \varepsilon_{ij} \quad \forall i \in 1 \dots n, \forall j \in 1 \dots m$$

dove covariata e rumore sono generati da due normali tra loro indipendenti:

$$w_{ij} \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, 1) \quad \forall i \in 1 \dots n, \forall j \in 1 \dots m$$

$$\varepsilon_{ij} \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, 0.5^2) \quad \forall i \in 1 \dots n, \forall j \in 1 \dots m$$

e  $\beta$  è fissato a 1. Se il modello è buono, c'è da aspettarsi che la parte di funzione stimata senza covariata sia vicina a  $f(\mathbf{p}, t)$  e che  $\hat{\beta}$  si avvicini a 1.

Anche in questo caso è necessaria una analisi preliminare per fissare i valori di  $\lambda$  ottimizzando l'indice GCV( $\lambda$ ), che nel caso con covariata si differenzia dal precedente solo per la forma della *smoothing matrix*. Dopo alcuni tentativi su griglie discrete (esattamente come nel caso precedente) è stato ottenuto un minimo in corrispondenza di  $\lambda = (10^{-0.5}, 10^{-3.25})$ .

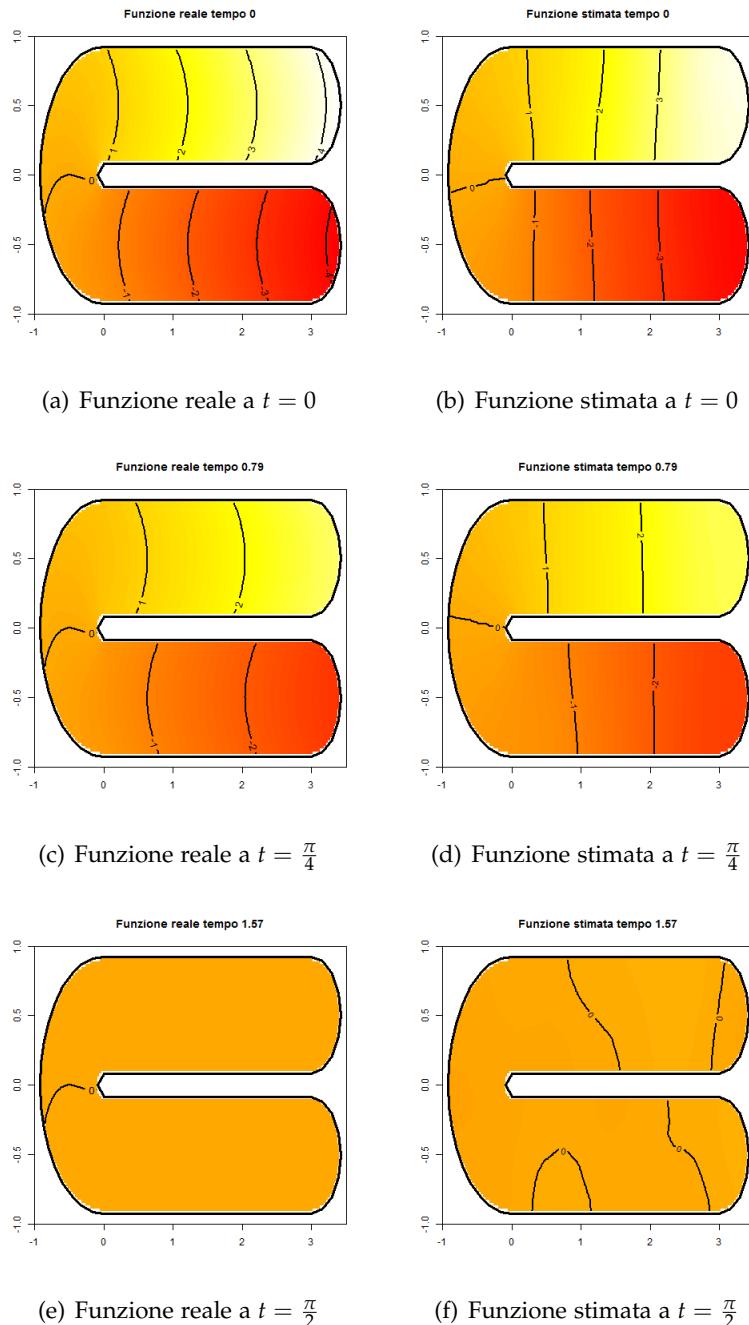


Figura 4.5: Stime della funzione  $f(\mathbf{p}, t)$  ad alcuni istanti di tempo, caso con covariata

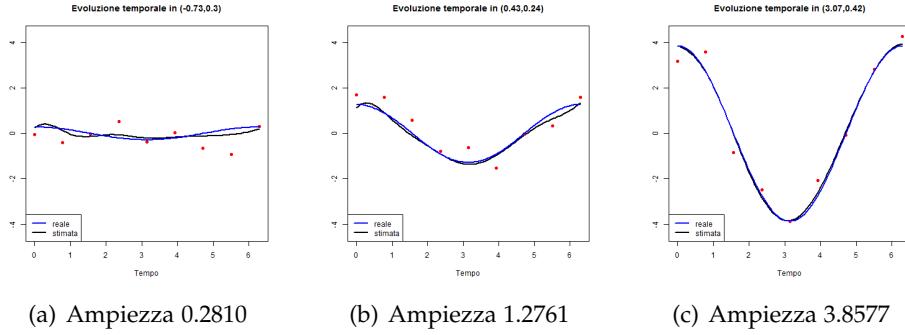


Figura 4.6: Evoluzione temporale in alcuni nodi della triangolazione, caso con covariata

In fig. 4.6, analogamente a quanto fatto nel caso senza covariata, si hanno i grafici dell’evoluzione temporale della funzione in alcuni punti spaziali. I punti rossi tracciati corrispondono alla parte di dato senza il termine dovuto alla covariata (ma con il rumore). Le conclusioni sono le stesse del caso senza covariata: la stima è ben riuscita e la vera variazione temporale è stata colta dal modello. Tuttavia, avvicinandosi alla parte centrale del dominio, si di nuovo ha una maggiore influenza del rumore.

Dai grafici precedenti si può concludere che la stima della parte funzionale della risposta sia effettivamente vicina alla reale. Occorre verificare anche che il contributo della covariata sia ben riconosciuto dal modello, controllando il valore stimato di  $\beta$ . Si ha:

$$\hat{\beta} \approx 1.001 ,$$

valore vicinissimo al reale. Per poter controllare con una data significatività se il valore stimato corrisponde a quello reale si costruisce un intervallo di confidenza al 95% approssimato per  $\beta$  con quanto ricavato in sez. 2.2.1. Ne risulta:

$$\beta \in [0.9809; 1.0225]$$

che contiene 1.

Concludendo, la simulazione esposta in questo capitolo ha permesso di verificare, in un caso dalle caratteristiche totalmente note e con una forte dipendenza dalla geometria spaziale, l’appropriata stima del campo spazio-temporale e del termine con covariata. Grazie a questi risultati (e alla possibilità di conoscere i valori reali su tutto il dominio) si può dedurre che questo esempio sia adatto per il confronto delle stime del modello ST-PDE con le altre tecniche disponibili in letteratura.

### 4.3.1 Validazione dell'intervallo di confidenza approssimato

L'intervallo di confidenza riportato precedentemente è stato costruito tramite l'assunzione di asintotica gaussianità per lo stimatore  $\hat{\beta}$ . Grazie a ciò è stato possibile calcolare un intervallo approssimato per  $\beta$  attraverso l'uso della distribuzione gaussiana. Questa ipotesi può essere validata controllando l'asintotica normalità degli estimatori.

Per poter verificare l'asintotica normalità degli estimatori sono state eseguite 100 simulazioni del caso di dominio a forma di C con covariata appena esposto. Tuttavia, in questo caso, il rumore non è stato generato da una distribuzione gaussiana ma da una t di Student a 5 gradi di libertà, per poter verificare tale ipotesi in un caso in cui la gaussianità non è presente per costruzione. Ad ogni iterazione sono stati calcolati  $\hat{\beta}$  e le stime di  $\hat{f}(p, t)$  nei 1197 punti in cui sono stati generati i dati. Al termine delle 100 simulazioni è stata controllata la gaussianità di queste stime con i p-values del Shapiro-Wilk test, corretti con *false discovery rate* (descritto in [3]).

Il p-value per  $\hat{\beta}$  è 0.928. Quindi l'asintotica normalità per questo estimatore è verificata. Per quanto riguarda le stime puntuali di  $f(p, t)$ , i p-values corretti sono stati riportati in fig. 4.7.

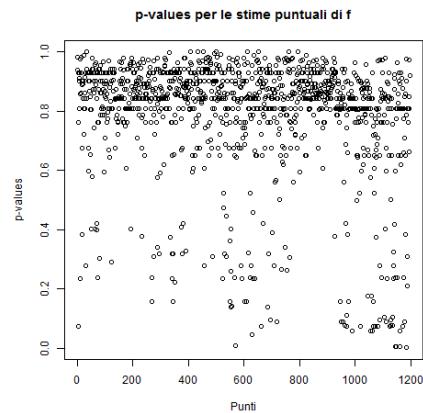


Figura 4.7: p-values corretti per  $\hat{f}(p, t)$

I p-values sono molto alti (superano la soglia di 0.05 nel 99.5% dei casi). Si può quindi concludere per l'asintotica normalità delle stime di  $\hat{f}(p, t)$  anche in questo caso con errore non generato da una normale.



## CAPITOLO 5

---

### Confronto con altri metodi

---

Il modello ST-PDE, come è già stato evidenziato nel cap. 1, non è l'unico modello disponibile per l'analisi di dati distribuiti sia in spazio che in tempo. Pertanto è necessario che sia confrontato con le altre principali metodologie presenti in letteratura, al fine di poter dire se e quanto tale modello possa rappresentare un miglioramento in questo campo. I confronti saranno eseguiti nel caso della simulazione sul dominio a forma di C, poiché la conoscenza della funzione reale permette il calcolo dell'errore di stima.

Una tecnica da confrontare è senza dubbio il kriging spazio-temporale (KRIG). Le stime sono ottenute fissando un variogramma separabile e marginalmente esponenziale in spazio e tempo. I parametri del variogramma sono stimati dal variogramma empirico e, successivamente, è possibile calcolare la stima grazie alle funzioni del pacchetto R *gstat* (descritto in [13]). Il caso con covariata non è implementato nel pacchetto, quindi il kriging sarà analizzato solo nel caso senza covariata. Come è già stato sottolineato precedentemente, questa tecnica non è in grado di considerare il dominio spaziale. Pertanto ci si aspettano stime peggiori rispetto ai metodi che possiedono questa caratteristica.

Assieme al modello costruito, in [1] è possibile consultare il codice per il calcolo della stima. Molte funzioni per l'applicazione di questo modello sono implementate nel pacchetto R *mgcv* (descritto in [22], [23], [24], [25], [26]). Questa pubblicazione studia modelli che possono essere più complessi di quello analizzata con ST-PDE, ipotizzando che una funzione del valore atteso della risposta (nel loro caso il logaritmo) possa essere spiegato da uno o più termini funzionali:

$$\log(\mathbb{E}[z_i]) = f_1 + f_2 + \dots f_N .$$

Ognuna di queste funzioni può avere dipendenza solo spaziale, solo temporale o entrambe. Per un corretto confronto con il modello ST-PDE sarà considerato un solo termine funzionale, costituito dal prodotto tensoriale dei modelli marginali in spazio e tempo (definiti dalle funzioni di base e dai termini di penalizzazione differenziali, analoghi a quelli proposti per ST-PDE) e studio della risposta senza ulteriori complicazioni. Anche modelli più complessi, con l'aggiunta di termini funzionali solo spaziali o solo temporali, sono stati confrontati con ST-PDE. Tuttavia, a causa dell'alto errore che producevano, non sono stati riportati. Come basi in tempo saranno adottate sempre le *Smoothing Splines*. In spazio, invece, saranno analizzati due casi:

- basi spaziali per *thin plate splines*, riportate in [25], non in grado di considerare la geometria spaziale (TPS);
- basi spaziali per *soap film smoothing*, analizzate nel dettaglio in [27] e utilizzate in [1] e [10], costituite da due insiemi di funzioni (rispettivamente per la parte interna del dominio e per la frontiera) appositamente pensate per casi con dominio spaziale complesso (SOAP).

La triangolazione e i dati sono gli stessi che sono stati usati nel cap. 4. In aggiunta è stata costruita una griglia spazio-temporale di punti per la validazione, attraverso l'uso di 80 punti equispaziati in  $[-1, +3.5]$ , 40 punti in equispaziati  $[-1, +1]$  e 20 istanti di tempo equispaziati in  $[0, 2\pi]$ . Ovviamen-tete l'errore è stato valutato soltanto sui punti che ricadevano all'interno del dominio a forma di C.

I modelli sono stati confrontati attraverso il Root Mean Square Error (RMSE) calcolato nei punti di validazione. Quindi se se  $V$  è l'insieme dei punti della griglia interni al dominio, fissato un modello si avrà:

$$\text{RMSE}_V = \sqrt{\frac{\sum_{(\mathbf{p}_i, t_i) \in V} (\hat{z}_{ij} - f(\mathbf{p}_i, t_i))^2}{\text{card}(V)}}$$

Il procedimento è stato iterato 50 volte, per poter escludere possibili effetti particolari dovuti alla generazione del rumore.

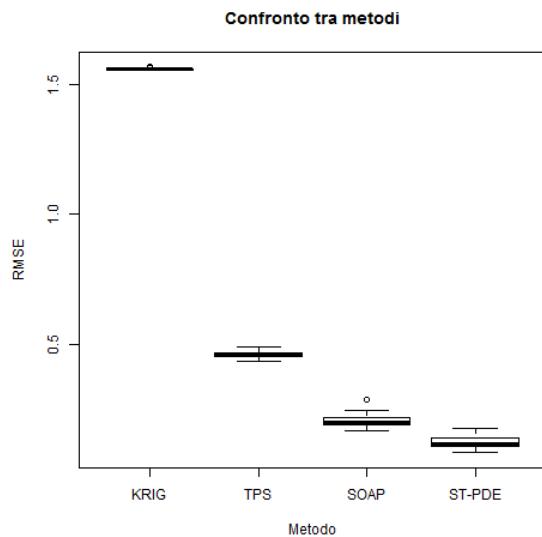


Figura 5.1: Confronto tra i metodi, caso senza covariata

## 5.1 Caso senza covariata

Nel caso senza covariata si hanno i risultati riportati in fig. 5.1, in cui sono stati tracciati i boxplot dei valori di RMSE ottenuti nelle 50 iterazioni per ogni metodo. Subito si nota che l'errore commesso è minore nel caso di ST-PDE, e quindi la stima ottenuta con il modello proposto è la migliore.

I risultati riflettono quanto è stato ipotizzato in precedenza: KRIG e TPS, che non considerano la geometria del problema, hanno prodotto gli errori più alti. Invece SOAP e ST-PDE commettono errori minori, ma tra i due il migliore è ST-PDE. Come ulteriore conferma di tutto ciò, in fig. 5.2 sono riportate le stime ottenute dai differenti metodi per i primi istanti di tempo.

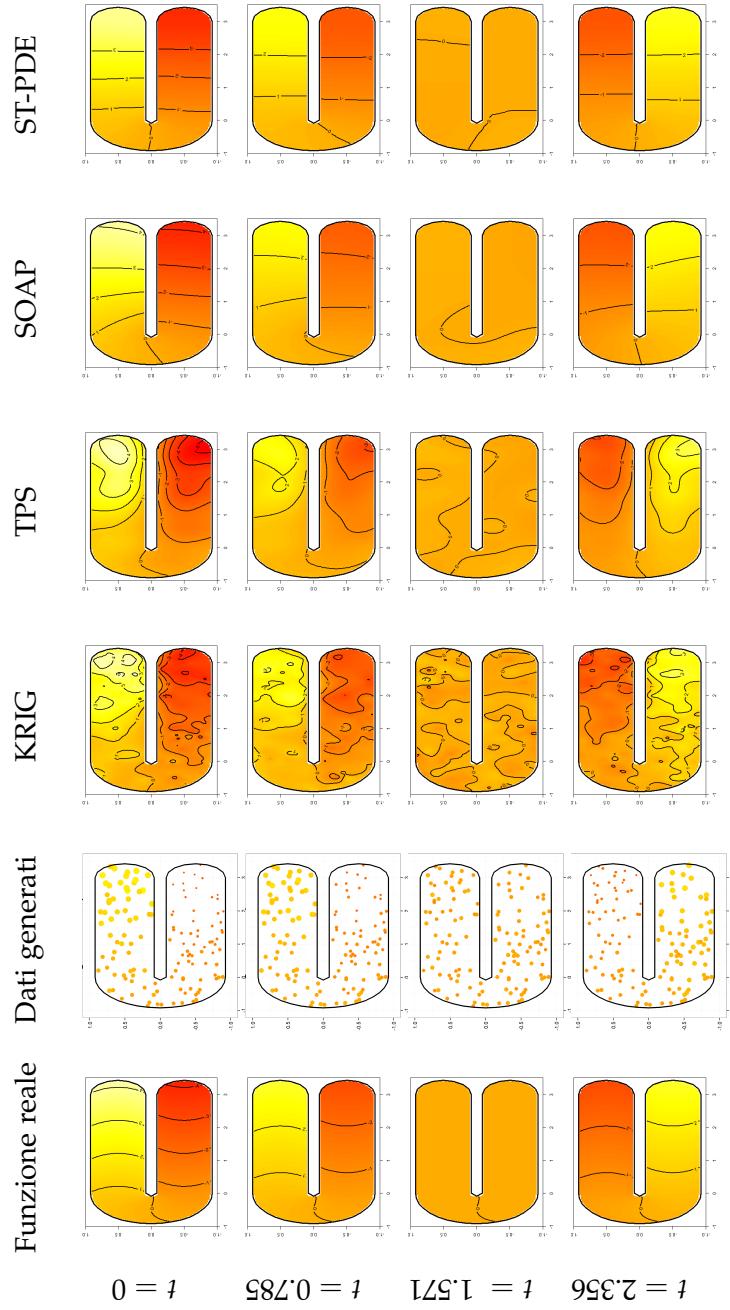


Figura 5.2: Per alcuni istanti di tempo, funzione test  $f(p, t)$  reale, dati simulati, stime ottenute rispettivamente con kriging spazio-temporale, modelli basati su thin plate splines, modelli basati su soap film smoothing, ST-PDE, caso senza covariata

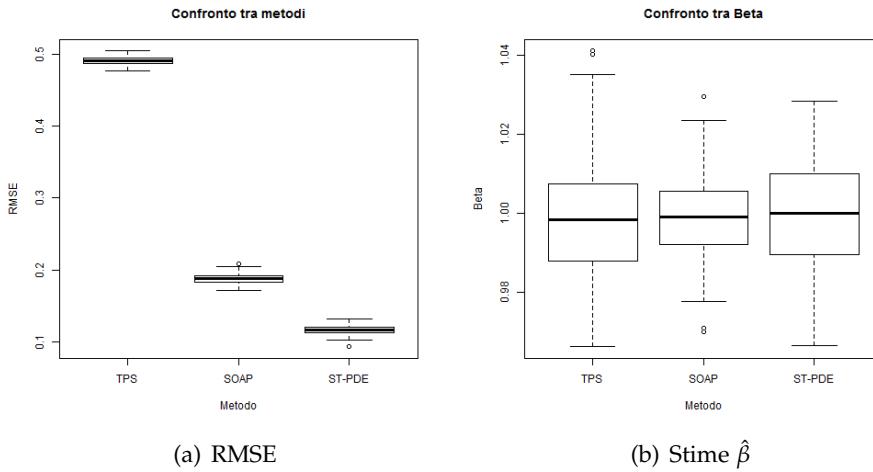


Figura 5.3: Confronto tra i metodi, caso con covariata

## 5.2 Caso con covariata

La stessa analisi è stata eseguita nel caso con covariata, generata in tutti i punti esattamente come fatto nel cap. 4. Nel calcolo del RMSE è stata considerata solo la parte di risposta spiegata dalla funzione  $f(p, t)$ , poiché non è opportuno generare nuovamente valori per la covariata nei punti di validazione. I boxplot riportati in fig. 5.3(a) possono quindi essere considerati come valutazione della bontà della stima della parte funzionale del modello. Per confrontare la parte spiegata dalla covariata sono stati tracciati i boxplot in fig. 5.3(b), con le stime di  $\hat{\beta}$  calcolate durante le 50 iterazioni. Come è già stato riportato in precedenza, il kriging non è stato analizzato poiché il caso con covariate non è implementato nel pacchetto *gstat*.

Le conclusioni sono perfettamente analoghe al caso precedente. La stima di  $\beta$  non presenta differenze, ma nella parte funzionale ST-PDE è nuovamente il migliore. Dai plot della funzione stimata ad alcuni istanti di tempo fissati in fig. 5.4 si possono trarre le stesse conclusioni dal caso senza covariata. Il modello ST-PDE è quello che più si avvicina alla funzione reale.

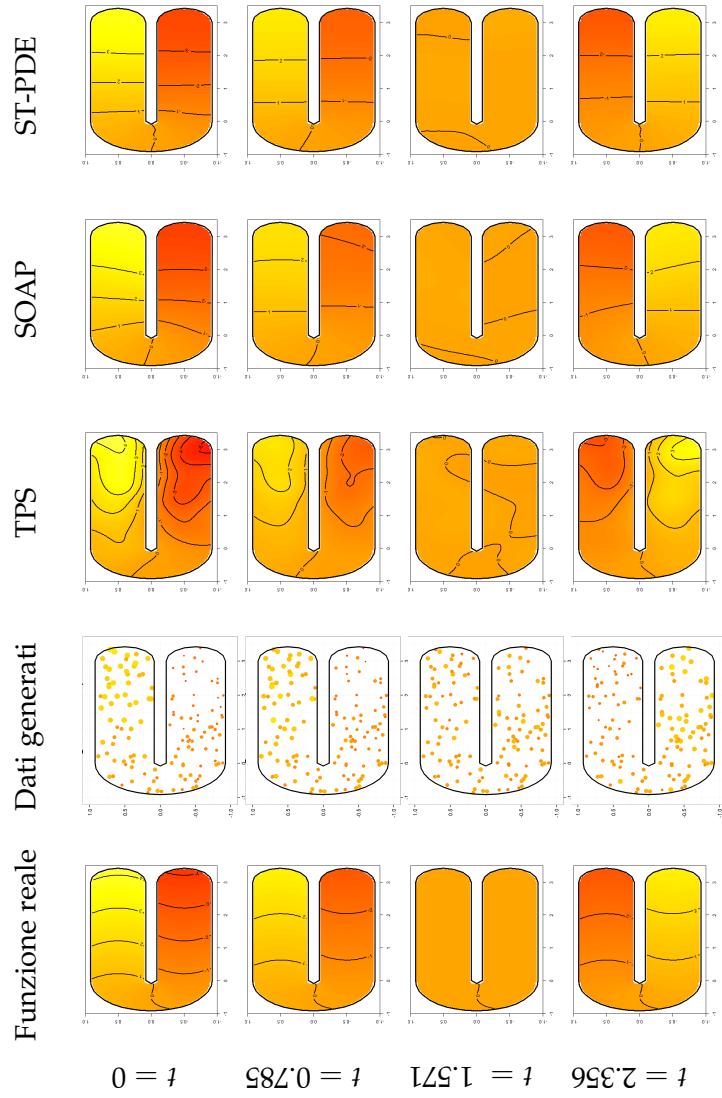


Figura 5.4: Per alcuni istanti di tempo, funzione test  $f(p, t)$  reale, dati simulati, stime ottenute rispettivamente con modelli basati su thin plate splines, modelli basati su soap film smoothing, ST-PDE, caso con covariata

## CAPITOLO 6

---

### Applicazione alla produzione di rifiuti urbani nella provincia di Venezia

---

L'applicazione principale per il modello ST-PDE in questo lavoro di tesi riguarda i dati della produzione di rifiuti urbani nel periodo di anni dal 1997 al 2011 nella provincia di Venezia. Per rifiuti urbani si intendono rifiuti domestici, rifiuti prodotti in locali, aree pubbliche, parchi, giardini o spiagge, rifiuti provenienti dalla pulizia delle strade o di altri luoghi pubblici. Non sono conteggiati i rifiuti speciali (tra cui ad esempio quelli industriali, agricoli o provenienti da attività commerciali o di costruzione) o pericolosi (per i quali esistono programmi di smaltimento particolari).

In realtà i dati raccolti dall'Agenzia Regionale per la Prevenzione e Protezione Ambientale del Veneto (Arpav) e condivisi sul sito Open Data Veneto riguardano tutta la regione. Tuttavia è stata analizzata solo la provincia di Venezia per due motivi. Innanzitutto l'interesse per la zona della laguna veneta e per le particolarità del dominio spaziale da cui essa è descritta. Inoltre, considerare tutto il Veneto aumenterebbe notevolmente le dimensioni delle matrici in gioco causando una grossa spesa computazionale per la ricerca della soluzione. Quindi è stato scelto di concentrarsi su un dominio più piccolo ma nel quale è possibile notare più facilmente le caratteristiche dell'andamento del fenomeno della produzione dei rifiuti urbani e le proprietà di stima del modello.

Per ogni comune della provincia di Venezia e per ogni anno è disponibile il numero di rifiuti totali raccolti in tonnellate e la popolazione residente. La popolazione è certamente un valore influente per la produzione di rifiuti, perciò la quantità di riferimento non sarà il valore dei rifiuti totali raccolti in ogni anno per comune, ma il valore pro capite.

La più importante ipotesi iniziale in questa applicazione è la scelta di riferire i dati riguardanti la raccolta dei rifiuti di tutto il territorio comunale ad un unico punto. La natura del dato (rifiuti prodotti ad esempio da residenti, turisti o da piccole attività) richiede che esso sia riferito alla zona urbanizzata del comune. Non avendo a disposizione questa quantità si hanno due possibili semplificazioni: studiare il dato come areale riferendolo all'intero comune (sebbene i rifiuti urbani non siano prodotti su tutto il territorio comunale) o localizzarlo in un punto corrispondente al paese più importante del comune. Per semplicità, i valori disponibili saranno considerati come puntualmente localizzati. Anche in tempo è stata fatta una semplificazione simile, perché i dati (valore di rifiuti prodotti in un intero anno) saranno riferiti agli istanti corrispondenti al cambio di anno.

Le coordinate spaziali dei comuni sono la longitudine e la latitudine, disponibili on line<sup>1</sup>. Nel caso dei comuni con dato replicato (sez. 6.2.2), le coordinate sono state ottenute da Google Maps.

## 6.1 Il turismo come possibile covariata

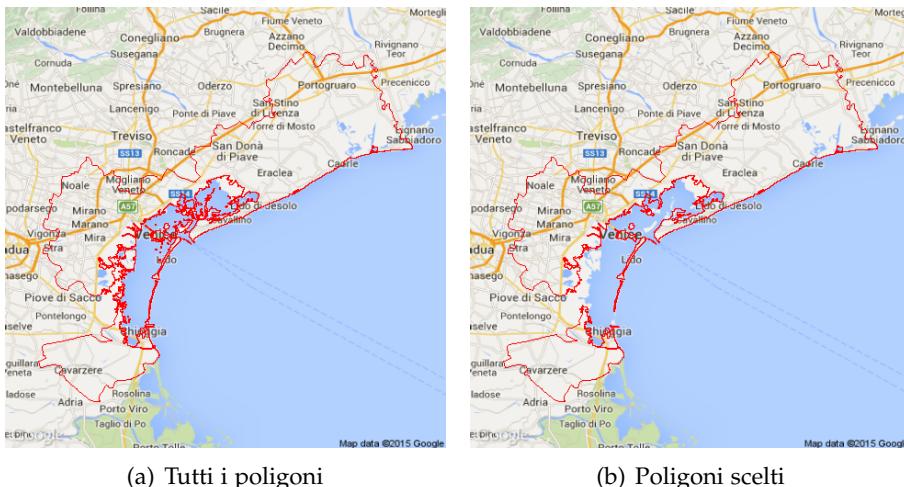
L'inclusione della popolazione residente nella risposta tramite l'uso dei valori pro capite è necessaria, poiché permette di depurare la risposta da una variabile che per sua natura la influenzerebbe. Ma sarebbe un errore fermarsi solo alla popolazione residente, poiché anche i turisti rappresentano una componente non trascurabile di produzione di rifiuti urbani.

Nella provincia di Venezia sono presenti molte zone di elevata attrazione turistica. Grande importanza è da attribuire a Venezia, ma si hanno anche zone balneari (come Lido di Venezia, Cavallino-Treporti, Jesolo, San Michele al Tagliamento, Bibione, ecc...). L'informazione scelta per sintetizzare l'attività turistica è il numero di posti letto nelle strutture ricettive sul territorio del comune, valore disponibile grazie all'applicativo dell'Istat *Atlante Statistico dei Comuni*<sup>2</sup> per ogni anno. Il totale dei posti letto per comune è la somma di vari tipi di attività non solamente alberghiere in senso stretto (ad esempio sono conteggiati anche esercizi complementari, bed & breakfast, campeggi) e sarà considerato normalizzato per la popolazione residente per uniformità con la risposta. I valori ricavati saranno inseriti nel modello come possibile covariata.

---

<sup>1</sup><http://www.dossier.net/utilities/coordinate-geografiche/>

<sup>2</sup><http://www.istat.it/it/archivio/113712>

Figura 6.1: Poligoni disponibili nel pacchetto *raster*

## 6.2 Trattamento del dominio

Per poter studiare il problema a livello computazionale occorre avere una buona approssimazione della frontiera della regione. Questa è disponibile nel pacchetto R *raster* che descrive dati geografici di moltissime zone del mondo sia a livello nazionale che locale (nel caso italiano province e comuni) tramite poligoni molto precisi.

Una volta scaricata la provincia di Venezia da *raster* (descritto in [7]), si è riscontrato subito un problema: la regione è composta da un insieme di 101 poligoni distinti (a causa delle numerose isole di cui è composta la laguna) e ogni poligono ha un alto numero di vertici (ad esempio, la prima delle due regioni corrispondenti alla parte interna della provincia ha 10538 vertici). Non è possibile analizzare il problema su un territorio così descritto, perciò è stata necessaria una analisi iniziale della frontiera per ridurne la complessità.

Oltre all'entroterra (composto da due poligoni) saranno considerate solo le più più rilevanti isole della laguna a livello di popolazione e turismo: Venezia, Murano, Lido di Venezia, Pellestrina e Chioggia (composta da due poligoni). In fig. 6.1 (tracciata, come per le successive, con il pacchetto R *RgoogleMaps* descritto in [9]) sono visualizzati i poligoni disponibili in *raster* e quelli scelti per l'analisi. Come sarà indicato nel paragrafo successivo, tutte queste isole sono state trattate per la riduzione dei vertici e, per creare un poligono unico, sono state unite tra loro con ponti dove era possibile. Tra le isole collegate solamente via mare con il resto del territorio sono stati simulati ponti in corrispondenza delle trafficate linee di trasporto pubblico con traghetto.

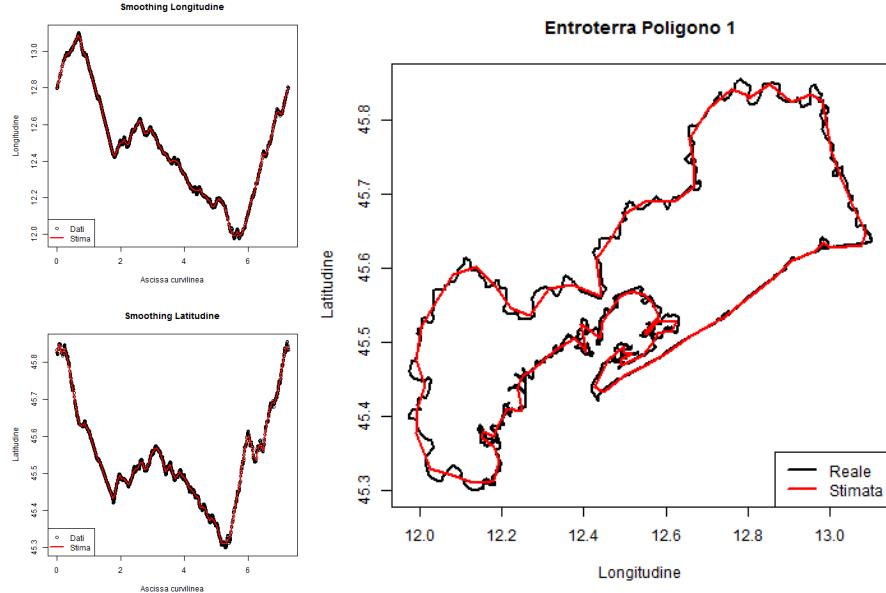


Figura 6.2: Smoothing con *Regression Splines* cubiche per il primo poligono dell’entroterra della provincia di Venezia

### 6.2.1 Regression Splines

Per ridurre l’elevato numero di vertici di ognuno dei poligoni considerati (e la conseguente complessità della stima) è stato necessario ricorrere a tecniche di smoothing di dati funzionali (descritte in [16]). Ad ogni poligono è possibile associare una coppia di funzioni: la latitudine e la longitudine rispetto all’ascissa curvilinea (disponibili per punti, corrispondenti ai vertici di *raster*) da rappresentare in funzioni di base. Successivamente, le nuove funzioni stimate sono state valutate in un numero molto inferiore di valori dell’ascissa curvilinea. Con le nuove coordinate ottenute dopo questo procedimento è stata costruita la nuova definizione della regione.

Per avere una rappresentazione ottimale tramite funzioni di base sono state provate più tecniche. La scelta definitiva è ricaduta sull’uso di *Regression Splines* cubiche senza penalizzazione della derivata seconda. Infatti i risultati non sono stati migliori con le altre tecniche provate a causa della zona interna alla laguna di Venezia, fortemente frastagliata: ad esempio penalizzare la derivata seconda ha eliminato troppe asperità presenti sulle coste del territorio, mentre l’utilizzo di *Kernel Smoothing* ha portato alla definizione di regioni che, dopo la triangolazione, presentavano un maggior numero di triangoli composti solamente da punti di frontiera (e quindi senza dati) rispetto agli altri metodi.

Una volta fissato un ragionevole numero di punti con cui descrivere la regione sono stati eseguiti più tentativi per decidere il miglior numero di

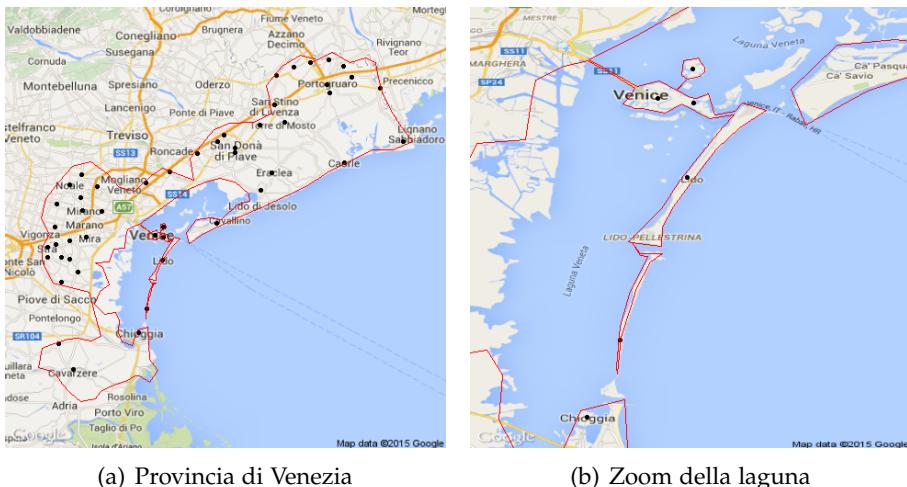


Figura 6.3: Frontiera e punti spaziali per la provincia di Venezia

funzioni di base. Il criterio di scelta è stato complesso, poiché sono stati esclusi i valori che generavano intersezioni nella nuova descrizione della regione e comuni esterni alla frontiera. Il miglior valore per *Regression Splines* è stato quello che, una volta eseguito lo smoothing della regione, ha causato la minor distanza tra i nuovi punti della regione e il poligono iniziale di *raster*. In fig. 6.2 è riportato il risultato dello smoothing sul primo poligono che descrive l'entroterra della provincia di Venezia (nella versione definitiva ha 100 punti, molti meno dei 10538 iniziali).

Dopo aver ripetuto l'analisi per ognuna delle isole elencate precedentemente (eccetto Chioggia, aggregata al dominio in modo molto più semplificato), la descrizione finale è stata ricavata unendo tra loro tutti i nuovi poligoni. In seguito è stata eliminata una zona costiera dell'entroterra della laguna di Venezia che, sebbene presente sia in *raster* che nei grafici di Google Maps, corrisponde ad una parte fangosa e paludosa e quindi disabitata. Non essendo possibile che su di essa siano prodotti rifiuti, è stata tagliata dalla regione. Per questo motivo si troverà sempre una zona non analizzata sui grafici con mappe di Google Maps. In fig. 6.3 è riportata la descrizione finale del dominio con i punti spaziali considerati.

### 6.2.2 Replica dei dati

L'uso di valori pro capite per rifiuti e covariata consente di replicare il dato del comune anche su altri punti in cui risulta necessario. Ad esempio, le isole di Murano, Lido di Venezia e Pellestrina non sono sedi di comune, ma si riferiscono a Venezia. Quindi il dato di Venezia è stato replicato in queste isole ad ogni anno, per avere un valore di riferimento anche nelle

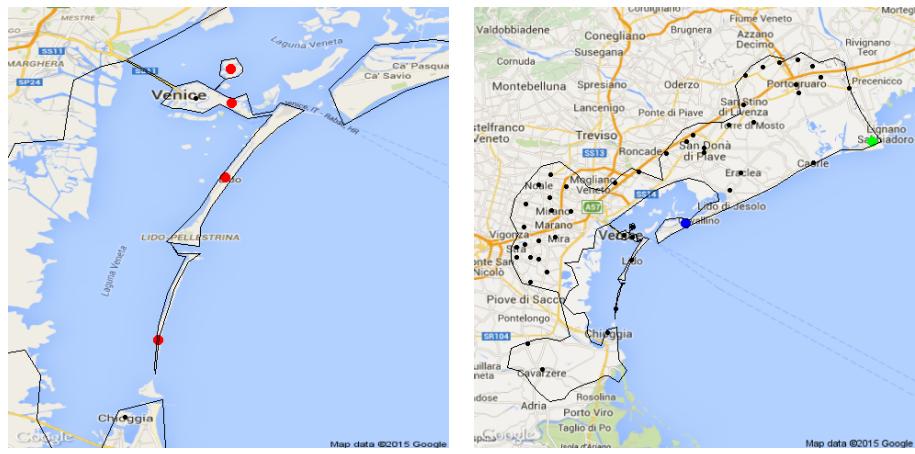
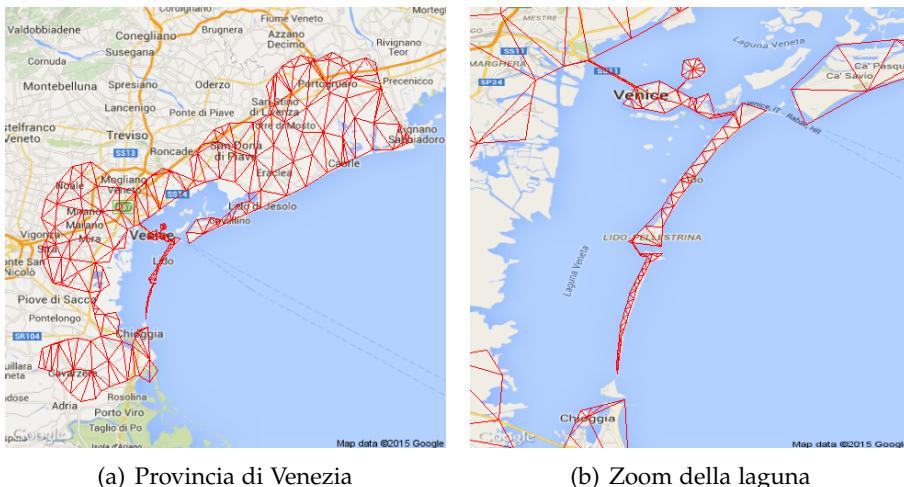


Figura 6.4: Dati replicati

isole. Infatti, se si avesse a disposizione l'area urbanizzata del comune a cui riferire il dato, queste isole sarebbero sicuramente considerate. Quindi non è opportuno trascurarle. I dati replicati dal comune di Venezia sono visualizzati in rosso in fig. 6.4(a). Come si può notare, anche nell'isola di Venezia è stato duplicato il dato, per poter ottenere una triangolazione senza troppi triangoli composti solo da punti di frontiera in una zona di particolare rilevanza.

Un caso particolare riguarda il comune di Cavallino-Treporti, che è stato istituito nel 1999 con una parte dei territori del comune di Venezia. La separazione all'interno dei dati, però, è presente dal 2002. Di conseguenza prima di questo anno il dato in Cavallino-Treporti è una replica del dato di Venezia. Cavallino-Treporti corrisponde al punto blu in fig. 6.4(b).

Anche in Bibione, località balneare vicina a Lignano Sabbiadoro (che però non è in Veneto) ed interna alla regione (punto verde in fig. 6.4(b)), è stato replicato il dato. Il comune di riferimento di Bibione (San Michele al Tagliamento) è lontano, pertanto si genera una parte di territorio senza dati molto ampia nell'estremità orientale della provincia. Come nel caso delle isole della laguna, questa zona avrebbe un valore di riferimento se si considerasse l'area urbanizzata del comune. Quindi la replica della misurazione in Bibione consente di coprire anche un'estremità del dominio altrimenti priva di riferimenti e di avere un dato in una zona rilevante (già dai grafici in fig. 6.6 e 6.7 si potrà capire l'importanza della zona balneare in questo studio).



(a) Provincia di Venezia

(b) Zoom della laguna

Figura 6.5: Triangolazione della provincia di Venezia

### 6.2.3 Triangolazione del dominio

La triangolazione è stata prodotta tramite il pacchetto R *RTriangle*. Poiché nella zona ad est il numero di capoluoghi di comune (e quindi di nodi della triangolazione) è minore rispetto al resto della regione, è stata fissata un'area massima per i triangoli generati da *RTriangle*. Questo ha reso la triangolazione più fitta anche dove non lo sarebbe stata, e garantirà una stima della risposta più precisa nella zona balneare che, come si potrà notare in seguito, ha una grande importanza per la distribuzione dei rifiuti. Affinchè questo sia possibile sono stati aggiunti nuovi punti spaziali all'interno della regione, che resteranno senza dato per tutta l'analisi ma saranno utili per la definizione dei triangoli. In fig. 6.5 si ha la triangolazione finale che sarà usata da ora in avanti.

In conclusione, il dominio è descritto da 418 punti (49 con dati, 369 di frontiera o aggiunti durante la creazione della triangolazione) e da 480 triangoli.

## 6.3 Analisi preliminare dei dati

Prima di eseguire l'analisi, è opportuno avere una visualizzazione dei dati sul dominio della provincia di Venezia. In fig. 6.6 e 6.7 sono visualizzati, rispettivamente, i valori dei rifiuti e dei posti letto pro capite in strutture ricettive (realizzati grazie all'aiuto dei pacchetti R *ggplot2* e *ggmap*, descritti rispettivamente in [21] e [8]), che permettono di avere un'idea della loro distribuzione in spazio e tempo.

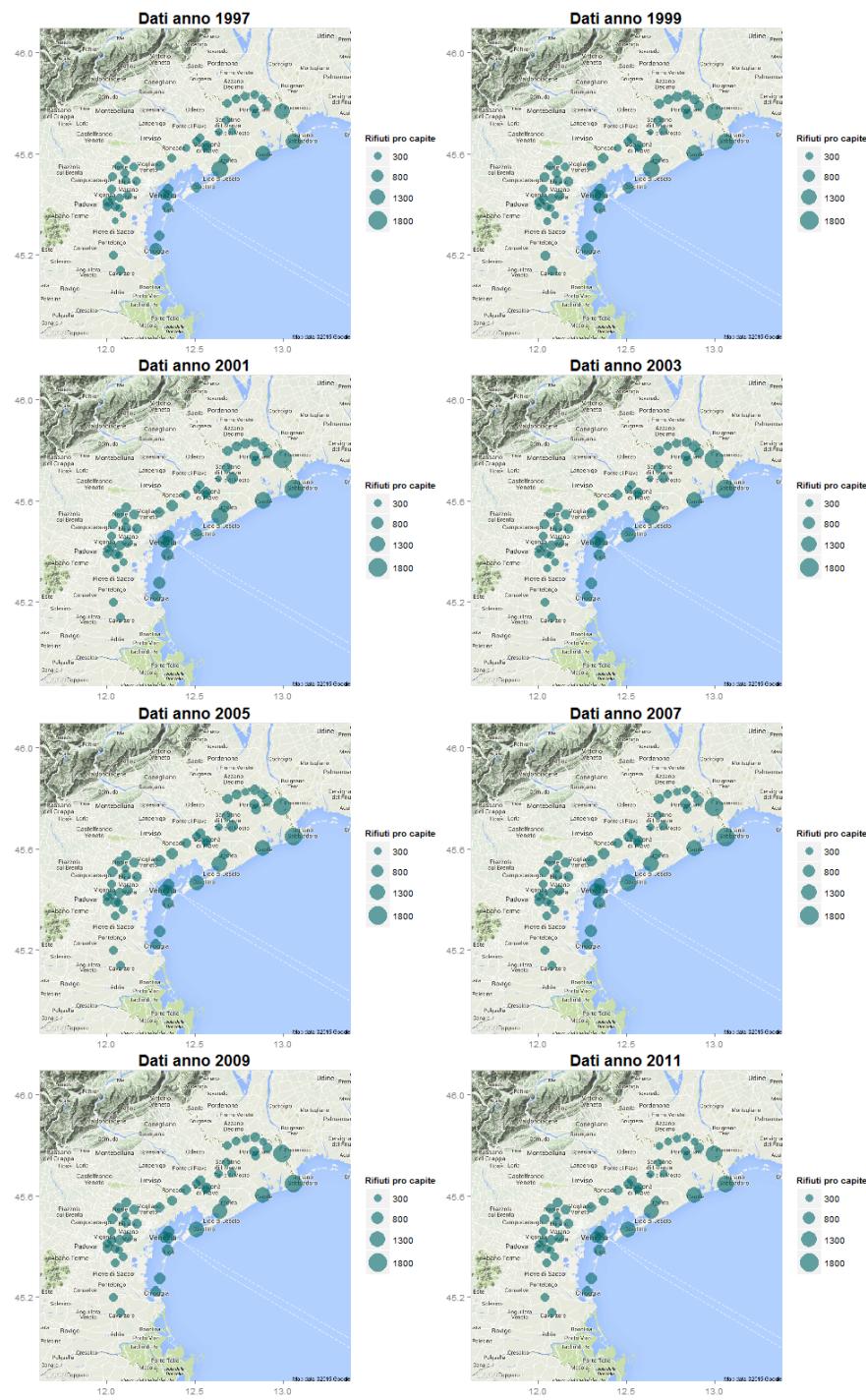


Figura 6.6: Rifiuti urbani pro capite ogni due anni dal 1997 al 2011

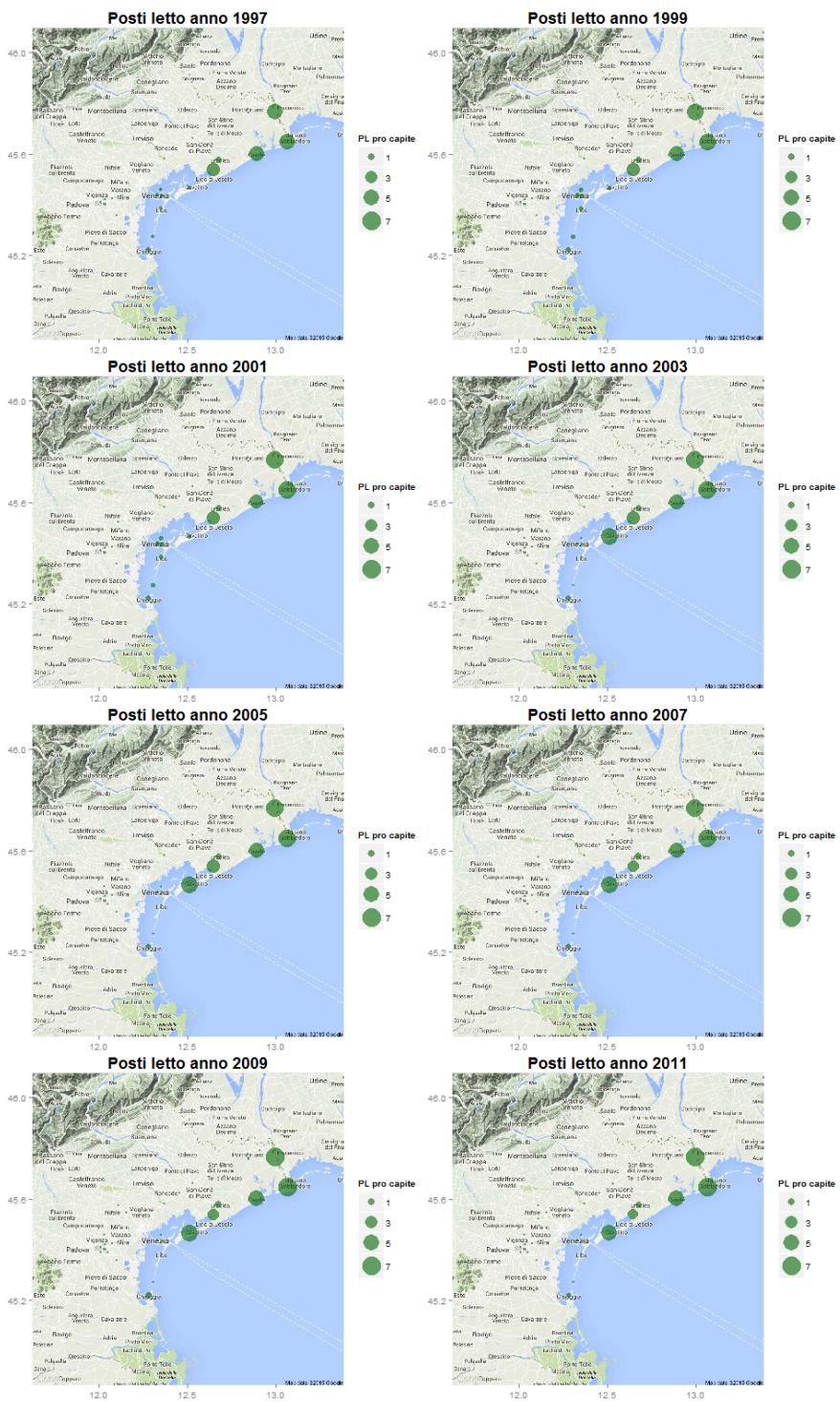


Figura 6.7: Posti letto pro capite in strutture ricettive ogni due anni dal 1997 al 2011

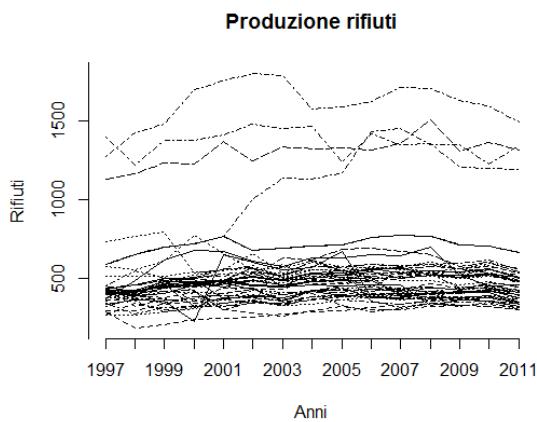


Figura 6.8: Andamento temporale della produzione dei rifiuti urbani nei comuni

Da questa analisi iniziale si può già notare come la produzione di rifiuti sia più alta nella zona balneare della regione e come non presenti grosse variazioni nel tempo in quasi tutti i comuni, poiché i dati sono più o meno simili negli anni. Questo è evidenziato anche in fig. 6.8, dove sono stati collegati tra loro i dati al variare del tempo per ogni comune. Si distinguono subito due gruppi (valori più alti per la zona balneare e più bassi negli altri comuni) totalmente distinti, eccetto per un comune (Cavallino-Treporti) che subisce un forte innalzamento nel tempo.

Dai grafici in fig. 6.7 per il numero di posti letto pro capite in strutture ricettive si può notare che la covariata assume valori decisamente più alti nella zona balneare rispetto al resto della regione. Contrariamente a quello che si potrebbe pensare, non si ha un elevato valore di posti letto nell'isola di Venezia. Invece si ha una grossa variazione nel comune di Cavallino-Treporti dopo la separazione dal comune di Venezia (si nota che il raggio della bolla aumenta notevolmente dopo il 2002). Questo indica che i posti letto sono in realtà più densi in Cavallino-Treporti, ma quando il dato era unito al comune di Venezia questo effetto non poteva essere colto in modo così dettagliato. Nella parte centrale del dominio quasi non si notano i punti corrispondenti alla covariata a causa del fatto che i valori assunti sono prossimi allo zero.

### 6.3.1 Funzioni di base

Le basi in spazio scelte per l'applicazione del modello sono gli elementi finiti lineari anche in questo caso. Ad ognuno dei punti spaziali (interni o di frontiera) è associata una funzione di base, coerentemente con la trian-

golazione prodotta. Di conseguenza si ha  $N = 418$  mentre il numero di punti con dati  $n$  è minore ed è pari a 49.

In tempo, esattamente come nel caso del dominio a forma di C, saranno adottate come funzioni di base le B-splines cubiche. L'intervallo temporale per la descrizione del dominio è [1997, 2011] e i dati sono disponibili con cadenza annuale. Anche in questo caso si assume che il numero di basi sia pari al numero di istanti temporali a disposizione, quindi  $M = m = 15$ .

## 6.4 Applicazione del modello senza covariata

Prima di calcolare i risultati dell'analisi occorre fissare i parametri  $\lambda_S$  e  $\lambda_T$ . Il procedimento è perfettamente analogo a quello ricavato nel caso del dominio a forma di C per ricavare una buona approssimazione del minimo di  $GCV(\lambda)$  in eq. (2.25). A seguito di alcuni tentativi su griglie discrete, la produzione dei rifiuti è stata analizzata con  $\lambda = (10^{-9}, 10^{-0.125})$ . In fig. 6.10 sono riportati i risultati ottenuti nei 15 anni a disposizione. Questi grafici permettono di studiare il profilo della funzione nei vari istanti temporali in modo molto accurato, perché la scala cromatica è stata resa uniforme tra tutti gli anni.

Successivamente sarà rappresentata anche la stima dell'evoluzione temporale della funzione in alcuni comuni, riportati in fig. 6.9.

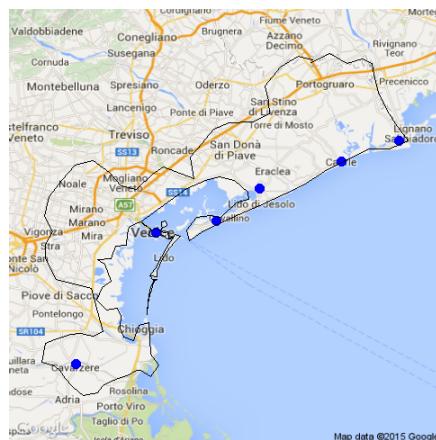
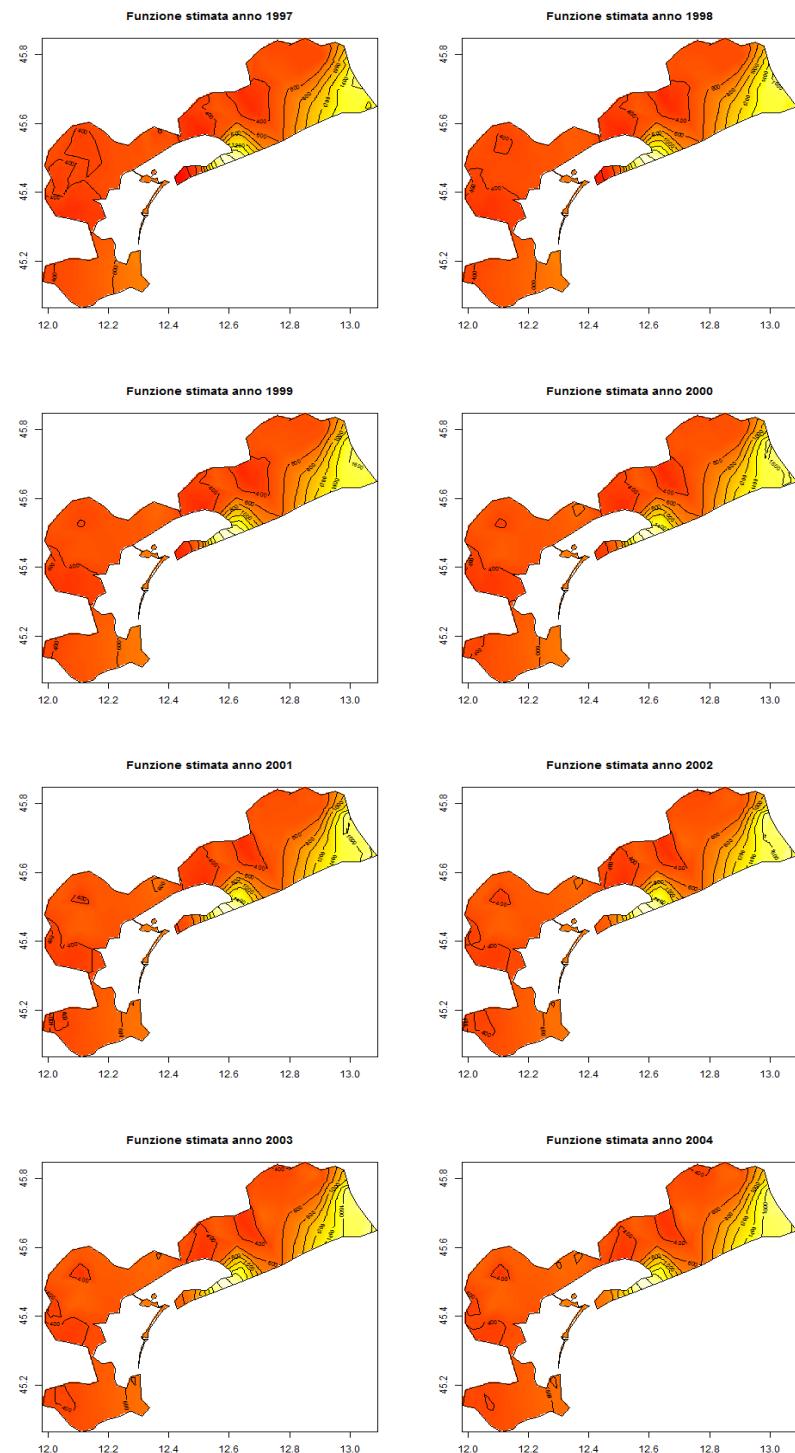


Figura 6.9: Comuni selezionati per l'analisi dei risultati



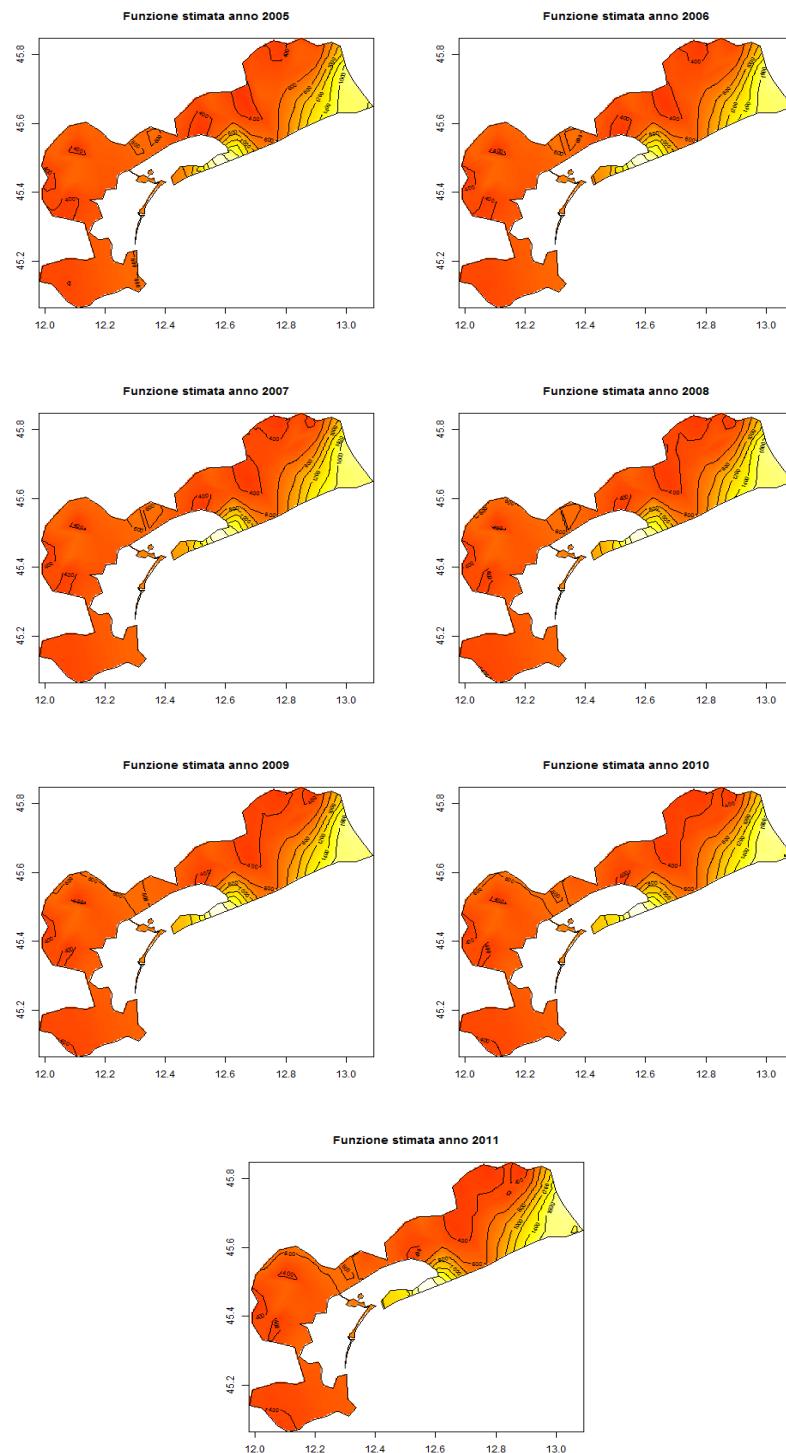


Figura 6.10: Stima della funzione spazio-temporale della produzione di rifiuti urbani pro capite nella provincia di Venezia a tempi fissati dal 1997 al 2011, caso senza covariata

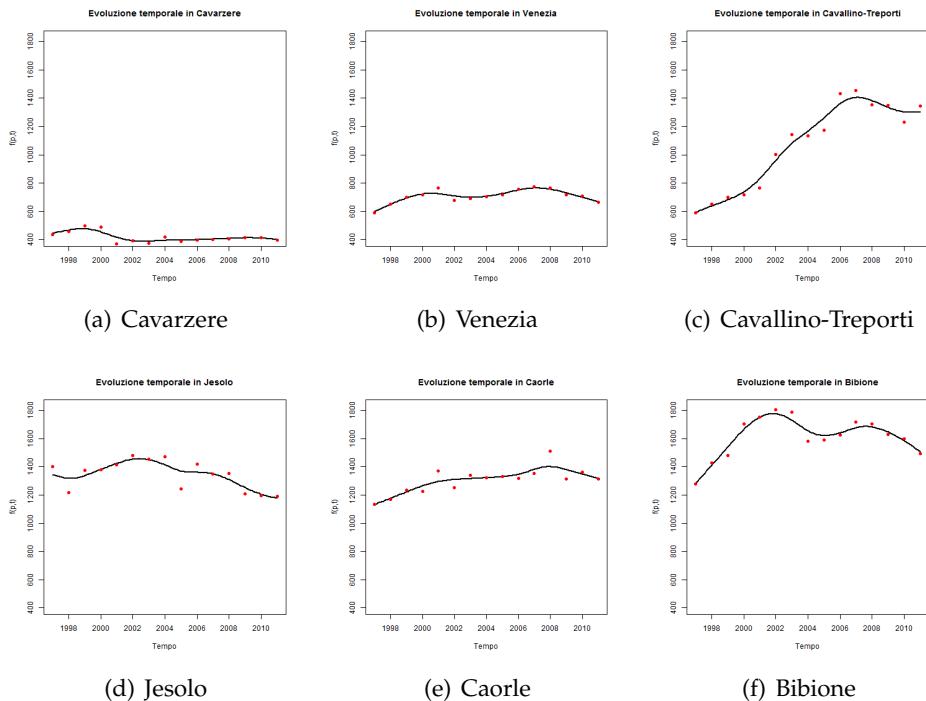


Figura 6.11: Stima della produzione di rifiuti urbani pro capite in alcuni comuni, caso senza covariata

I grafici spaziali in fig. 6.10, coerentemente con quanto già notato per il dato in fig. 6.7, riportano i massimi nella zona balneare del territorio e i minimi nella parte interna. Il dato è massimo in Bibione (e questo conferma la necessità di replicare il dato). Contrariamente a quello che si poteva pensare prima di questa analisi, non è Venezia la località turistica con maggiore produzione di rifiuti. Questa prima analisi conferma la necessità di inserire la covariata nel modello per poter tener conto degli effetti legati al turismo, poiché nelle zone dove la stima è massima si hanno anche i valori più alti della covariata.

Si noti anche come cambia la stima in Cavallino-Treporti (già si vedeva in fig. 6.8). La separazione dal comune di Venezia del 2002 rende il dato più accurato in Cavallino-Treporti, la cui produzione di rifiuti cresce negli anni. Quindi l'utilizzo di questo metodo, che considera accuratamente la geometria spaziale del problema, si conferma appropriato. Se non fosse tenuta esclusa la zona marittima della laguna, il dato di Cavallino-Treporti influenzerebbe i comuni circostanti, Venezia compresa. Invece l'effetto dell'innalzamento del dato si propaga solo verso sud-ovest, fino al termine della piccola parte di terra prima del mare.

Le variazioni temporali della funzione, in generale, non sono marcate

(i grafici in fig. 6.10 sono molto simili) ma si possono notare alcune particolarità. In fig. 6.11 sono visualizzati gli sviluppi temporali stimati in alcuni comuni. I punti rossi corrispondono al dato misurato. La funzione stimata spiega bene l'andamento tracciato dai dati iniziali. Ad esempio, nei grafici di Venezia e Cavallino-Treporti, i cambiamenti dovuti alla separazione del comune dal 2002 hanno provocato un mutamento dello sviluppo temporale, ma l'andamento generale è comunque colto dal modello. Anche dal grafico con gli sviluppi temporali si può notare come la produzione di rifiuti cresca in Cavallino-Treporti.

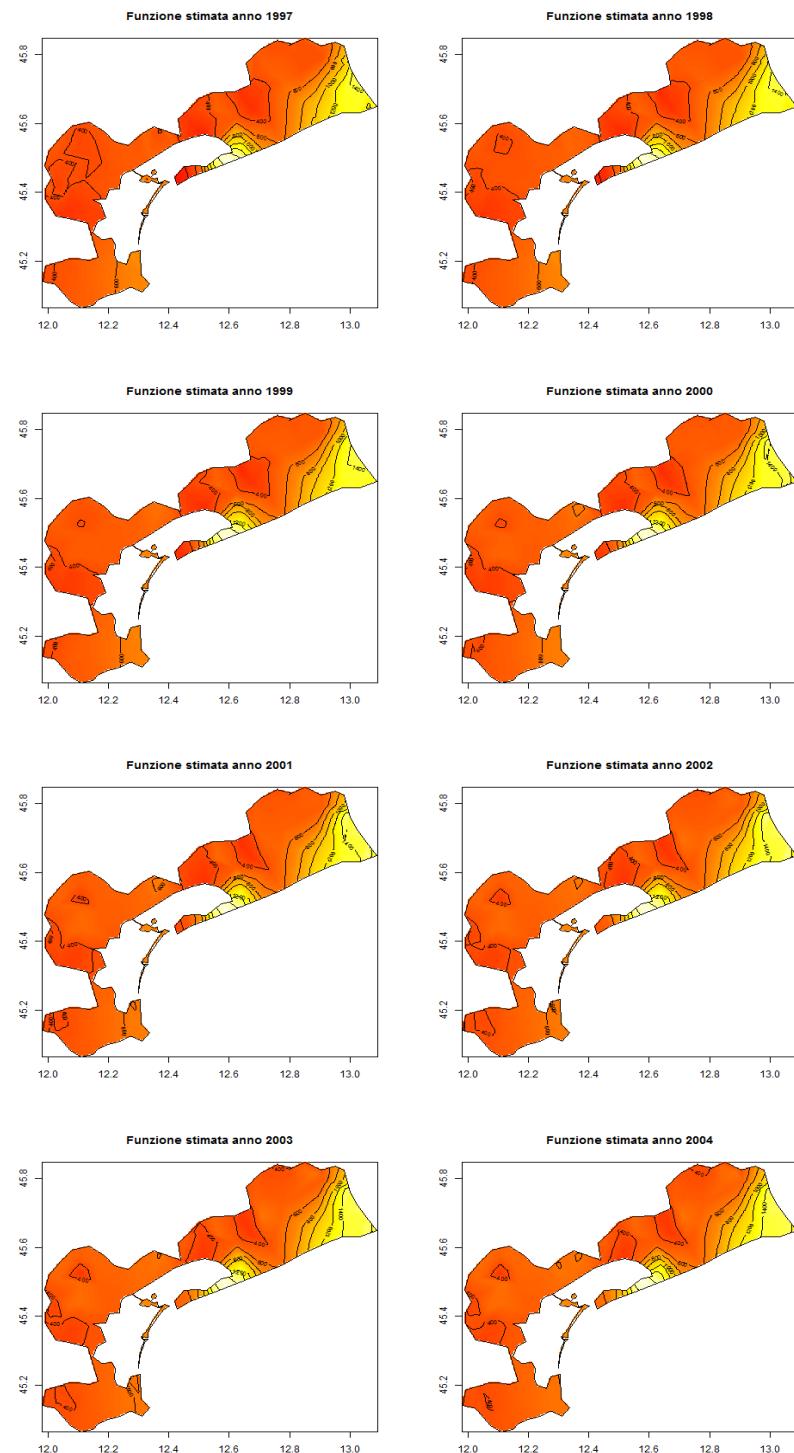
## 6.5 Applicazione del modello con covariata

Le analisi sono state eseguite con  $\lambda = (10^{-9}, 10^{-0.125})$ , valore ricavato come nei casi precedenti. La funzione stimata in questo caso può essere interpretata come la parte di rifiuti urbani prodotta dalla popolazione residente, poiché viene escluso da essa il termine riguardante il turismo.

Il modello stima

$$\hat{\beta} \approx 30.5563 .$$

Più la covariata è alta, più è sottratta informazione a  $\hat{f}(p, t)$  dal termine con covariata, poiché  $\hat{\beta}$  è costante in spazio e tempo. Quindi ci si può aspettare che la stima nella parte balneare della regione subisca maggiormente questo effetto.



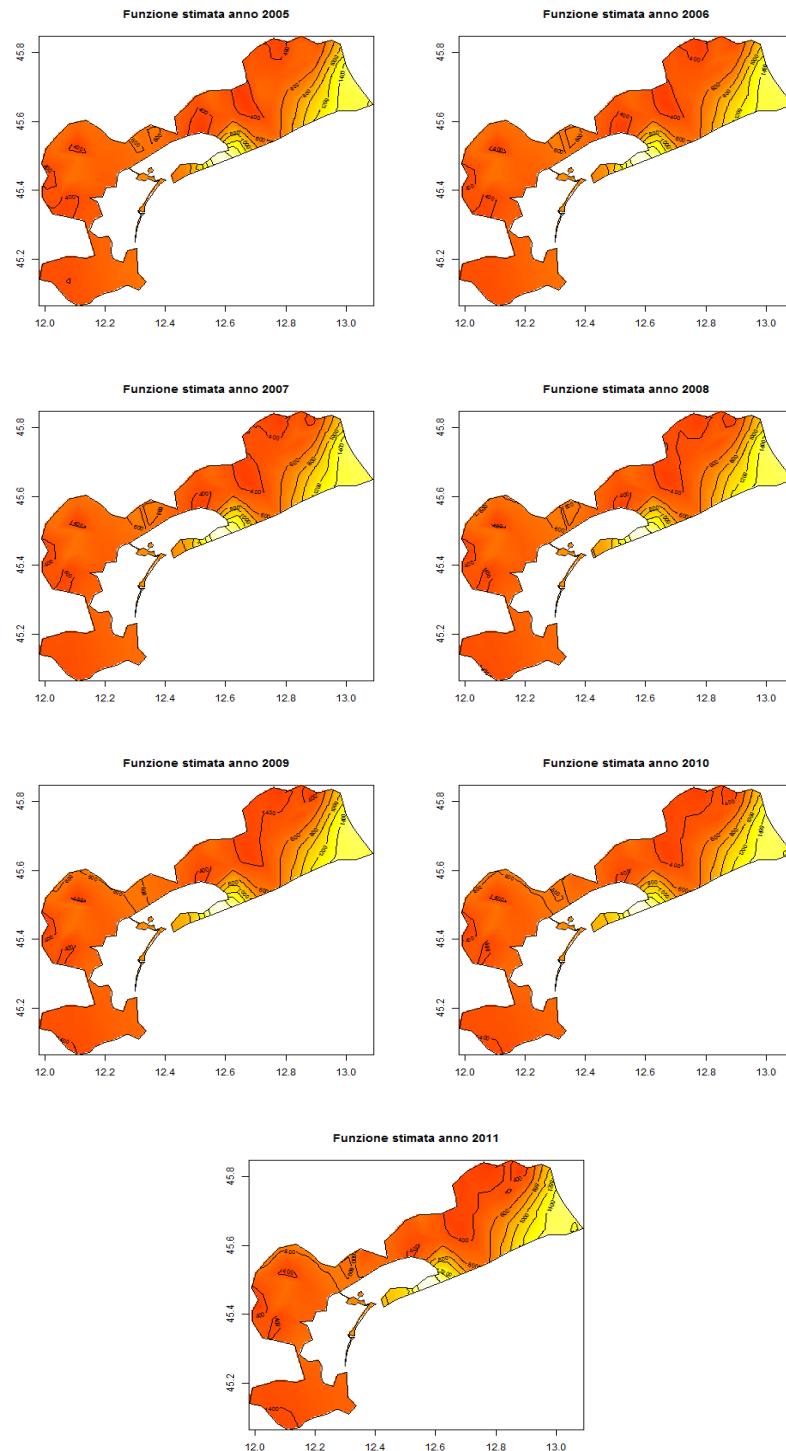


Figura 6.12: Stima della parte funzionale della produzione di rifiuti urbani pro capite nella provincia di Venezia a tempi fissati dal 1997 al 2011, caso con covariata

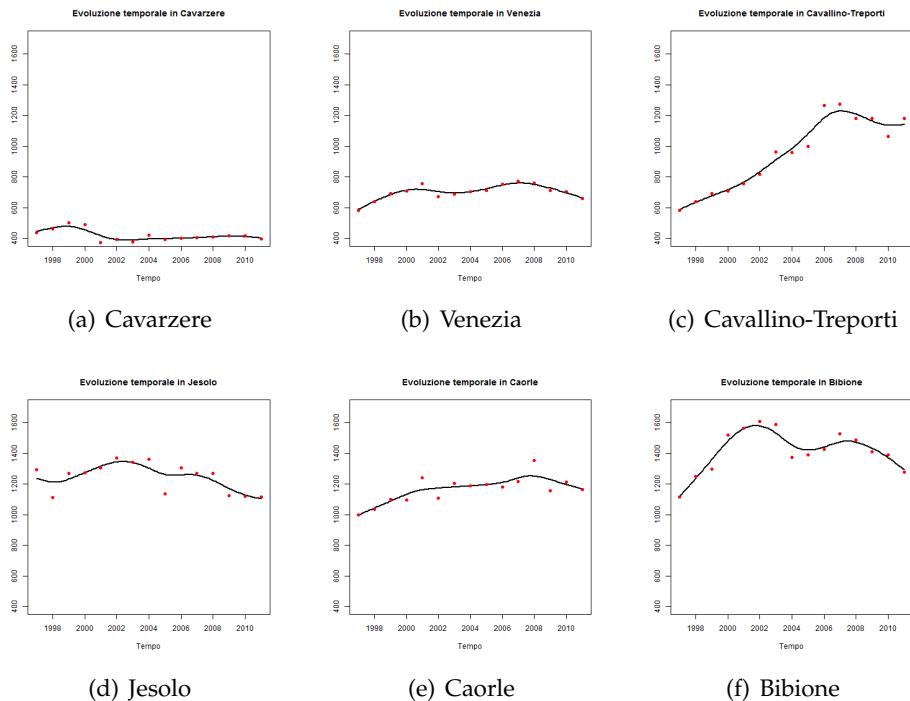


Figura 6.13: Stima della parte funzionale della produzione di rifiuti urbani pro capite in alcuni comuni, caso con covariata

Come si nota dai grafici spaziali in 6.12, la funzione ha un profilo simile al caso senza covariate. Il valore della covariata nella parte interna del dominio è quasi nullo (come era stato evidenziato in fig. 6.7) e più alto nella zona balneare. Quindi l'effetto della covariata non ha variato la stima della produzione di rifiuti pro capite nella parte interna della regione. Coerentemente all'interpretazione che si attribuisce a questa stima, avendo un valore quasi nullo per la covariata, la produzione di rifiuti pro capite della popolazione residente nella parte interna della regione è praticamente la stessa del modello precedente.

La funzione presenta nuovamente i massimi lungo la costa. Tuttavia, i valori di tali massimi sono minori rispetto al caso senza covariata. Una parte di produzione di rifiuti è stata associata al turismo, ma non si hanno comunque valori simili alla parte interna della regione. Se si interpreta la funzione stimata come parte dei rifiuti prodotta dalla popolazione residente si trovano ancora valori molto alti poiché risentono dell'effetto del turismo, che potrebbe non essere dipendente soltanto dalle capacità ricettive del territorio (ad esempio, molti turisti potrebbero giungere dalla parte interna della regione e fermarsi in giornata). Non avendo a disposizione ulteriori dati per esprimere in modo più accurato il turismo a livello

comunale ci accontentiamo di dire che la covariata è influente nella produzione di rifiuti urbani, poiché si trova il seguente intervallo di confidenza per  $\beta$ :

$$\beta \in [14.3158; 46.7767] .$$

L'alta produzione pro capite nella zona balneare della regione potrebbe essere dovuta alla mancanza di ulteriori covariate.

In fig. 6.13 sono tracciati i grafici della funzione stimata (senza il termine di covariata) negli stessi comuni che sono stati scelti per il caso senza covariata. I punti tracciati in rosso rappresentano il dato senza i termine della covariata, sottratto attraverso la moltiplicazione per  $\hat{\beta}$  stimato. Non possono essere considerati come la parte di dati generati esattamente dalla funzione, ma come una sua buona approssimazione (ma sono comunque ciò che è analizzato dal modello per le stime di  $\hat{c}$ , come già evidenziato in sez. 2.2). Anche in questo caso si vede chiaramente dai grafici che il modello ha colto molto bene l'andamento temporale dei dati. I profili sono simili al caso senza covariata e si nota di nuovo come i massimi siano minori rispetto a quelli in fig.6.11.



## CAPITOLO 7

---

### Conclusioni e sviluppi futuri

---

In questo lavoro di tesi è stato descritto nel dettaglio il modello ST-PDE per la regressione di dati varianti all'interno di un dominio spaziale e di un intervallo temporale. L'algoritmo di stima, particolarmente adatto a domini spaziali complessi, è stato implementato in codice R. Dal confronto con gli altri metodi e da quanto ricavato con le stime, soprattutto sul dominio a forma di C in cui è possibile conoscere il valore reale della funzione, si può concludere che i risultati prodotti sono molto buoni.

Il modello è illustrato attraverso l'applicazione allo studio della produzione dei rifiuti urbani tra il 1997 e il 2011 nella provincia di Venezia. I dati, per loro natura, si riferiscono alla zona urbanizzata del comune. Non avendo a disposizione la descrizione delle zone urbanizzate sono possibili due semplificazioni: considerare i dati come areali e riferirli a tutto il territorio del comune, o considerarli puntualmente localizzati nel paese di riferimento. In questa tesi sono stati analizzati i dati puntuali. Quindi un possibile sviluppo futuro di questo lavoro può essere l'estensione del modello a dati areali la conseguente applicazione a questo problema (con dati riferiti a tutto il territorio comunale). I risultati ottenuti dalla stima con dati puntiformi sono comunque buoni perché spiegano appropriatamente il fenomeno. Tuttavia, una conferma da un eventuale modello per dati areali sarebbe senza dubbio interessante.

Sono possibili anche alcune importanti considerazioni sulle prestazioni computazionali del codice. Per semplicità le basi degli elementi finiti sono state utilizzate soltanto lineari e la produzione dei rifiuti è stata analizzata solamente nella provincia di Venezia, pur avendo a disposizione i dati di tutto il Veneto. Inoltre, durante l'esecuzione del codice, si è potuto notare come alcune funzioni come la minimizzazione di  $GCV(\lambda)$  o il calcolo dei

valori stimati ad un istante di tempo fissato (usato per tracciare il profilo della funzione ad un certo anno) siano piuttosto lente. Ovviamente per analisi di dataset di grosse dimensioni deve essere messa in conto una spesa di tempo elevata, ma R certamente non ha aiutato. Infatti, è noto che R non sia un linguaggio di programmazione fortemente efficiente e questo ha prodotto la lentezza di esecuzione. Un chiaro sviluppo futuro può essere l'uso del codice come base per la creazione di un algoritmo più veloce attraverso l'integrazione con un linguaggio di programmazione più efficiente (come il C++) o dell'eventuale parallelizzazione nei colli di bottiglia più evidenti. Dopo che sarà stata sviluppata l'integrazione del codice sarà possibile garantire un'analisi più agile anche per dataset di dimensioni più elevate o per elementi finiti di ordine maggiore.

---

## Bibliografia

---

- [1] N.H. Augustin, V.M. Trenkel, S.N. Wood, P. Lorance, *Space-time modeling of blue ling for fisheries stock management*, Environmetrics, 24, pp. 109–119, 2013.
- [2] D. Bates, M. Maechler, *Matrix: Sparse and Dense Matrix Classes and Methods*, R package version 1.1-5, 2015, <http://CRAN.R-project.org/package=Matrix>
- [3] Y. Benjamini, Y. Hochberg, *Controlling the false discovery rate: a practical and powerful approach to multiple testing*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 57, pp. 289–300, 1995.
- [4] W. Caballero, R. Giraldo, J. Mateu, *A universal kriging approach for spatial functional data*, Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 27(7), pp. 1553-1563, Springer, 2013.
- [5] P. Craven, G. Wahba, *Smoothing noisy data with spline functions: estimating the correct degree of smoothing by the method of generalized cross-validation*, Numerische Mathematik, 31, pp. 377–403, 1979.
- [6] N. Cressie, C.K. Wikle, *Statistics for spatio-temporal data*, John Wiley & Sons, 2011.
- [7] R.J. Hijmans, *raster: Geographic data analysis and modeling*, R package version 2.3-24, 2015. <http://CRAN.R-project.org/package=raster>
- [8] D. Kahle, H. Wickham, *ggmap: Spatial Visualization with ggplot2*, The R Journal, 5(1), pp. 144-161. <http://journal.r-project.org/archive/2013-1/kahle-wickham.pdf>

- [9] M. Loecher, *RgoogleMaps: Overlays on Google map tiles in R*, R package version 1.2.0.6, 2014. <http://CRAN.R-project.org/package=RgoogleMaps>
- [10] G. Marra, D.L. Miller, Luca Zanin, *Modelling the spatiotemporal distribution of the incidence of resident foreign population*, Statistica Neerlandica, 66, pp. 133–160, 2012.
- [11] A. Menafoglio, A. Guadagnini, P. Secchi, *A kriging approach based on Aitchison geometry for the characterization of particle-size curves in heterogeneous aquifers*, Stochastic Environmental Research and Risk Assessment, 28(7), pp. 1835-1851, 2014.
- [12] A. Menafoglio, P. Secchi, M. Dalla Rosa et al., *A Universal Kriging predictor for spatially dependent functional data of a Hilbert Space*, Electronic Journal of Statistics, 7, pp. 2209-2240, 2013.
- [13] E.J. Pebesma, *Multivariable geostatistics in S: the gstat package*, Computers & Geosciences, 30, pp. 683-691, 2000.
- [14] A. Quarteroni, *Modellistica numerica per problemi differenziali*, Springer-Verlag Italia, 2012.
- [15] R Core Team, *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, 2013, <http://www.R-project.org/>
- [16] J.O. Ramsay, B.W. Silverman, *Functional Data Analysis*, Springer, 2005.
- [17] J.O. Ramsay, H. Wickham, S. Graves, G. Hooker, *fda: Functional Data Analysis*, R package version 2.4.3, 2013, <http://CRAN.R-project.org/package=fda>
- [18] T.O. Ramsay, *Spline smoothing over difficult regions*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 64, pp. 307–319, 2002.
- [19] L.M. Sangalli, J.O. Ramsay, T.O. Ramsay, *Spatial spline regression models*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 75, pp. 681–703, 2013.
- [20] J.R. Shewchuk, *Triangle: Engineering a 2D quality mesh generator and Delaunay triangulator*, in: M.C. Lin, D. Manocha (eds.), *Applied Computational Geometry: Towards Geometric Engineering*, 1148, series Lecture Notes in Computer Science, pp. 203-222, Springer-Verlag, 1996. From the First ACM Workshop on Applied Computational Geometry.
- [21] H. Wickham, *ggplot2: elegant graphics for data analysis*, Springer New York, 2009.

- [22] S.N. Wood, *Fast stable restricted maximum likelihood and marginal likelihood estimation of semiparametric generalized linear models*, Journal of the Royal Statistical Society (B) 73(1), pp. 3-36, 2011.
- [23] S.N. Wood, *Stable and efficient multiple smoothing parameter estimation for generalized additive models*, Journal of the American Statistical Association, 99, pp. 673-686, 2004.
- [24] S.N. Wood, *Generalized Additive Models: An Introduction with R*, Chapman and Hall/CRC, 2006.
- [25] S.N. Wood, *Thin-plate regression splines*, Journal of the Royal Statistical Society (B), 65(1), pp. 95-114, 2003.
- [26] S.N. Wood, *Modelling and smoothing parameter estimation with multiple quadratic penalties*, Journal of the Royal Statistical Society (B), 62(2), pp. 413-428, 2000.
- [27] S.N. Wood, M.W. Bravington, S.L. Hedley, *Soap film smoothing*, Journal of the Royal Statistical Society, Series B, 70, pp. 931–955, 2008.