Iterativne numerične metode v posplošenih linearnih modelih

Mitja Mandić
Mentor: izr. prof. dr. Jaka Smrekar

1. april 2021

Posplošeni linearni modeli

- Slučajni del, sistematični del, povezovalna funkcija

$$g(\mu) = \eta = x^\top \beta$$

Posplošeni linearni modeli

- Slučajni del, sistematični del, povezovalna funkcija

$$g(\mu) = \eta = x^\top \beta$$

- Linearna regresija:

$$\mathbb{E}(Y) = \mu = X\beta$$

- Problem - ni najboljša. Rešitev? Transformacija pričakovane vrednosti

Posplošeni linearni modeli

- Slučajni del, sistematični del, povezovalna funkcija

$$g(\mu) = \eta = x^\top \beta$$

- Linearna regresija:

$$\mathbb{E}(Y) = \mu = X\beta$$

- Problem - ni najboljša. Rešitev? Transformacija pričakovane vrednosti
- Za kategorične podatke $\rightarrow$ binomska porazdelitev

$$\text{logit}(p_i) = \log(\frac{p_i}{1-p_i}) = x_i^T \beta$$

Točkovno ocenjevanje

- *Cenilka* je funkcija vzorca, s katero ocenjujemo določeno karakteristiko

Točkovno ocenjevanje

- *Cenilka* je funkcija vzorca, s katero ocenjujemo določeno karakteristiko
- Dve glavni metodi za določanje: metoda momentov in metoda največjega verjetja

Metoda momentov

- Prvič jo predstavi Čebišev leta 1887
- Enostavnejša za računanje brez računalnika

Metoda momentov

- Prvič jo predstavi Čebišev leta 1887
- Enostavnejša za računanje brez računalnika
- Karakteristiko izrazimo kot funkcijo momentov $c(X) = g(m_1(X), m_2(X), \ldots, m_r(X))$ in jo ocenimo z $g(\hat{m}_1, \ldots, \hat{m}_r)$

Metoda največjega verjetja

- Najprej privzemimo gostote oblike $f_X(x;\theta) = f(x;\theta_1, \ldots, \theta_r)$ za nek $\theta \in \Theta$
- Pri fiksni realizaciji poskusa definiramo *funkcijo verjetja*

$$F(X_1, \ldots, X_n; \underbrace{\theta_1, \ldots, \theta_r}_{\theta}) = f(X_1, \theta) \cdots f(X_n, \theta)$$

- Iščemo θ, kjer bo imela maksimum, kar bo natanko ničla odvoda $\log F$
- Sistemu

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \log F(X, \theta) = 0$$

  pravimo sistem enačb verjetja, njegova rešitev je *cenilka največjega verjetja*
- Niso nujno nepristranske, so pa dosledne, če je rešitev enolična
- Običajno niso eksplicitno rešljive

Eksponentna družina

$$f_Y(y;\theta,\phi) = \exp\left(\frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)\right)$$

za neke $a(\cdot), b(\cdot)$ in $c(\cdot)$, θ pa imenujemo tudi naravni parameter.

Eksponentna družina

$$f_Y(y;\theta,\phi) = \exp\left(\frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)\right)$$

za neke $a(\cdot), b(\cdot)$ in $c(\cdot)$, θ pa imenujemo tudi naravni parameter.
Označimo z

$$L(y;\theta,\phi) = \log f_Y(y;\theta,\phi) = \frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)$$

in njen odvod (funkcijo zbira)

$$\frac{\partial}{\partial\theta} L = \ell(y;\theta,\phi) = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$$

Eksponentna družina

$$f_Y(y;\theta,\phi) = \exp\left(\frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)\right)$$

za neke $a(\cdot), b(\cdot)$ in $c(\cdot)$, θ pa imenujemo tudi naravni parameter.
Označimo z

$$L(y;\theta,\phi) = \log f_Y(y;\theta,\phi) = \frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)} + c(y,\phi)$$

in njen odvod (funkcijo zbira)

$$\frac{\partial}{\partial\theta} L = \ell(y;\theta,\phi) = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$$

Iz predavanj STAT1 se spomnimo, da velja

$$\mathbb{E}(\ell) = 0.$$

Na podoben način z uporabo $\int f_Y(y;\theta)\, dy = 1$ pa dokažemo tudi *informacijsko enakost*

$$\mathbb{E}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} L(\theta)\right) = -\mathbb{E}\left((\frac{\partial}{\partial\theta} L(\theta))^2\right)$$

Z uporabo prve enakosti sledi

$$\frac{\partial}{\partial\theta}L = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)} \rightarrow \mu = b'(\theta)a(\phi)$$

Iz druge pa:

$$\mathbb{E}(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}L) = \mathbb{E}(\frac{b''(\theta)}{a(\phi)}) = \frac{b''(\theta)}{a(\phi)}$$

$$\mathbb{E}((\frac{\partial}{\partial\theta}L)^2) = \frac{1}{a(\phi)^2}\mathbb{E}((y-\mu)^2) = \frac{Var(Y)}{a(\phi)^2}$$

od koder direktno sledi

$$Var(Y) = -b''(\theta)a(\phi)$$

Zgled z binomsko porazdelitvijo

Naj bo $Y \sim \mathrm{Bin}(n, p)$ Verjetnost

$$\mathrm{P}(Y = y) = \binom{n}{y} p^y (1-p)^{n-y} = \exp\left(y \log(\frac{p}{1-p}) + n \log(1-p) + \log \binom{n}{k} \right),$$

od koder direktno sledi

$$\theta = \log \frac{p}{1-p} = \log \frac{\mu}{1-\mu},\ b(\theta) = \log(1 + e^{\theta}),\ \phi = 1, a(\phi) = \frac{\phi}{n},$$

V tem primeru velja torej $\theta = \mathrm{logit}(\mu) = X^{\top}\beta = \eta$ in *logit* je kanonična povezovalna funkcija za logistični model. Zakaj je to koristno?

Obvoz v numerične metode

- Za ocenjevanje parametrov β običajno rešujemo sistem enačb največjega verjetja
- v splošnem ni eksplicitno rešljiv in zato potrebujemo numerične metode

Obvoz v numerične metode

- Za ocenjevanje parametrov β običajno rešujemo sistem enačb največjega verjetja
- v splošnem ni eksplicitno rešljiv in zato potrebujemo numerične metode
- Newtonova metoda še vedno zelo aktualna zaradi kvadratična konvergence:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Je pa to metoda za iskanje ničel in ne ekstremov!

Prilagoditev Newtonove metode

Najprej zapišimo Taylorjev polinom funkcije zbira okoli iskane vrednosti θ

$$L'(\theta) \approx L'(\theta_0) + L''(\theta_0)(\theta - \theta_0)$$

Prilagoditev Newtonove metode

Najprej zapišimo Taylorjev polinom funkcije zbira okoli iskane vrednosti θ

$$L'(\theta) \approx L'(\theta_0) + L''(\theta_0)(\theta - \theta_0)$$

Iščemo ekstrem funkcije, torej ničlo odvoda. Če vstavimo $\theta = \theta^*$

$$L'(\theta^*) = 0 \approx L'(\theta_0) + L''(\theta_0)(\theta^* - \theta_0)$$

Izrazimo in dobimo iteracijski korak

$$\theta_{t+1} = \theta_{t+1} - \frac{L'(\theta_{t+1})}{L''(\theta_{t+1})}$$

Prilagoditev Newtonove metode

Najprej zapišimo Taylorjev polinom funkcije zbira okoli iskane vrednosti θ

$$L'(\theta) \approx L'(\theta_0) + L''(\theta_0)(\theta - \theta_0)$$

Iščemo ekstrem funkcije, torej ničlo odvoda. Če vstavimo $\theta = \theta^*$

$$L'(\theta^*) = 0 \approx L'(\theta_0) + L''(\theta_0)(\theta^* - \theta_0)$$

Izrazimo in dobimo iteracijski korak

$$\theta_{t+1} = \theta_{t+1} - \frac{L'(\theta_{t+1})}{L''(\theta_{t+1})}$$

Kaj gre lahko narobe?

Prilagoditev Newtonove metode

- Invertiranju Hessiana se lahko izognemo z uporabo premikov:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + h$$
$$L''(\theta_t)h = -L'(\theta_t)$$

Prilagoditev Newtonove metode

- Invertiranju Hessiana se lahko izognemo z uporabo premikov:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + h$$
$$L''(\theta_t)h = -L'(\theta_t)$$

- Newtonova metoda ni naraščajoč algoritem $\Rightarrow$ ne vemo ali se bo premikal navzgor ali navzdol

Prilagoditev Newtonove metode

- Invertiranju Hessiana se lahko izognemo z uporabo premikov:

$$\theta_{t+1} = \theta_t + h$$
$$L''(\theta_t)h = -L'(\theta_t)$$

- Newtonova metoda ni naraščajoč algoritem $\Rightarrow$ ne vemo ali se bo premikal navzgor ali navzdol
- Če je Hessejeva matrika pozitivno definitna je algoritem konstanten!

Fisher scoring

Podobno kot Newtonova, z eno ključno razliko:

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \frac{L'(\theta_i)}{\mathbb{E}(L''(\theta_i))}$$

Fisher scoring

Podobno kot Newtonova, z eno ključno razliko:

$$\theta_{i+1} = \theta_i + \frac{L'(\theta_i)}{\mathbb{E}(L''(\theta_i))}$$

Nazaj k eksponentni družini:

$$\log f_y(y; \theta) = L(y; \theta) = \frac{y\theta - b(\theta)}{a(\phi)}$$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = (\frac{\partial L}{\partial \theta})(\frac{\partial \theta}{\partial \mu})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j})$$

- $\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = (\frac{\partial L}{\partial \theta})(\frac{\partial \theta}{\partial \mu})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j})$$

- $\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$
- Z uporabo $(b')^{-1}(\mu) = \theta$ dobimo $\frac{\partial \theta}{\partial \mu} = \frac{1}{b''(\theta)} = \frac{a(\phi)}{var(Y)}$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = (\frac{\partial L}{\partial \theta})(\frac{\partial \theta}{\partial \mu})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j})$$

- $\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$
- Z uporabo $(b')^{-1}(\mu) = \theta$ dobimo $\frac{\partial \theta}{\partial \mu} = \frac{1}{b''(\theta)} = \frac{a(\phi)}{var(Y)}$
- $(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})$ bo odvisen od povezovalne funkcije, s tem se bomo ukvarjali pozneje

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = (\frac{\partial L}{\partial \theta})(\frac{\partial \theta}{\partial \mu})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j})$$

- $\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$
- Z uporabo $(b')^{-1}(\mu) = \theta$ dobimo $\frac{\partial \theta}{\partial \mu} = \frac{1}{b''(\theta)} = \frac{a(\phi)}{var(Y)}$
- $(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})$ bo odvisen od povezovalne funkcije, s tem se bomo ukvarjali pozneje
- $(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j}) = x_{ij}$

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = (\frac{\partial L}{\partial \theta})(\frac{\partial \theta}{\partial \mu})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j})$$

- $\frac{\partial L}{\partial \theta} = \frac{y - b'(\theta)}{a(\phi)}$
- Z uporabo $(b')^{-1}(\mu) = \theta$ dobimo $\frac{\partial \theta}{\partial \mu} = \frac{1}{b''(\theta)} = \frac{a(\phi)}{var(Y)}$
- $(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})$ bo odvisen od povezovalne funkcije, s tem se bomo ukvarjali pozneje
- $(\frac{\partial \eta}{\partial \beta_j}) = x_{ij}$

Končno,

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = \frac{y - \mu}{var(Y)} \frac{\partial \mu}{\partial \eta} x_{ij}$$

Ujemanje F-S in N-R

Če pa uprabimo kanonično povezovalno funkcijo je $\theta = \eta$ in zato $\frac{\partial \mu}{\partial \theta} = b''(\theta)$ in funkcija zbira postane

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = \frac{y - \mu}{var(Y)} b''(\theta) x_{ij} = \frac{y - \mu}{a(\phi)} x_{ij}$$

Ujemanje F-S in N-R

Če pa uprabimo kanonično povezovalno funkcijo je $\theta = \eta$ in zato $\frac{\partial \mu}{\partial \theta} = b''(\theta)$ in funkcija zbira postane

$$\frac{\partial L}{\partial \beta_j} = \frac{y-\mu}{var(Y)} b''(\theta) x_{ij} = \frac{y-\mu}{a(\phi)} x_{ij}$$

Uporabimo $\mathbb{E}(\frac{\partial^2 L}{\partial \theta^2}) = -\mathbb{E}((\frac{\partial L}{\partial \theta})^2)$:

$$\begin{aligned}
-\mathbb{E}(\frac{\partial^2 L}{\partial \beta_j \partial \beta_k}) &= \mathbb{E}((\frac{\partial L}{\partial \beta_j})(\frac{\partial L}{\partial \beta_k})) \\
&= \mathbb{E}(\frac{y-\mu}{var(Y)^2})(\frac{\partial \mu}{\partial \eta})^2 x_{ij} x_{ik} \\
&= \frac{1}{var(Y)}(\frac{\partial \eta}{\partial \mu})^2 x_{ij} x_{ik} \\
&= \frac{b''(\theta)}{a(\phi)} x_{ij} x_{ik}
\end{aligned}$$

Po drugi strani pa je odvod funkcije zbira

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 L}{\partial\beta_j\partial\beta_k} &= \frac{\partial}{\beta_k}\{\left(\frac{\partial L}{\partial\theta}\right)\left(\frac{\partial\theta}{\partial\beta_j}\right)\} \\
&= \frac{\partial L}{\partial\theta}\left(\frac{\partial^2\theta}{\partial\beta_j\partial\beta_k}\right) + \left(\frac{\partial\theta}{\partial\beta_j}\right)\left(\frac{\partial^2 L}{\partial\theta^2}\frac{\partial\theta}{\partial\beta_k}\right) \\
&= 0 + \frac{\partial^2 L}{\partial\theta^2}x_{ij}x_{ik},
\end{aligned}$$

videli pa smo že da je

$$\frac{\partial^2 L}{\partial\theta^2} = -\frac{b''(\theta)}{a(\phi)}.$$

Sledi torej, da za kanonično povezovalno funkcijo Fisher-scoring algoritem in Newtnova metoda sovpadata!

Še več, iz predavanj se spomnimo da je

$$FI(\theta) = var(\frac{\partial}{\partial\theta} L)$$

$\Rightarrow$ Hessejeva matrika je za kanonično povezovalno funkcijo pozitivno definitna in Fisher scoring metoda je naraščajoča!

Logistični model - teorija v akciji

Spomnimo se:

$$g(\mu) = \text{logit}(p_i) = \theta_i = \eta_i = x_i^\top \beta$$

Logistični model - teorija v akciji

Spomnimo se:

$$g(\mu) = \text{logit}(p_i) = \theta_i = \eta_i = x_i^\top \beta$$

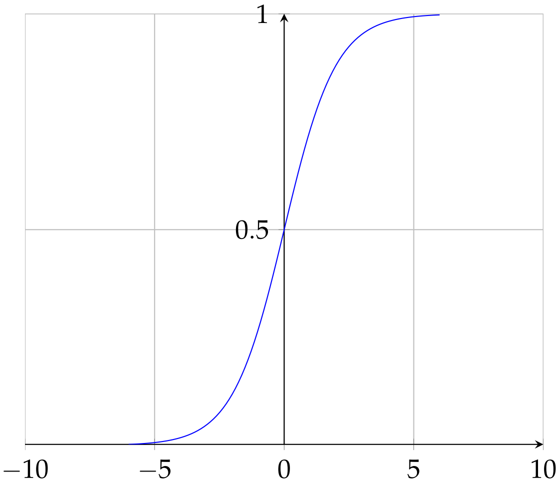
Imejmo slučajni vektor $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)$ z NEP komponentami porazdeljenimi binomsko

$$P(Y_i = y_i) = \binom{m_i}{y_i} p_i^{y_i} (1 - p_i)^{m_i - y_i}$$

Funkcija verjetja se glasi:

$$\begin{aligned}
L(p_i) &= \log\{\prod_{i=1}^{n} p_i^{y_i}(1-p_i)^{m_i-y_i}\} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\{y_i \log p_i + (m_i - y_i)\log(1-p_i)\} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\{m_i \log(1-p_i) + y_i \log\left(\frac{p_i}{1-p_i}\right)\}
\end{aligned}$$

$$p = \frac{e^{x^T\beta}}{1 + e^{x^T\beta}}$$



Enačbe verjetja v logističnem modelu

Upoštevamo še $\log \frac{p_i}{1-p_i} = x_i^\top \beta$ in dobimo

$$L(\beta) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i (x_i^\top \beta) - m_i \log(1 + \exp x_i^\top \beta) \right)$$

Od tu vidimo, da je res odvisna le od parametra β

Enačbe verjetja v logističnem modelu

Sedaj potrebujemo še odvode.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \beta_j}(x_i^\top \beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta_j}\left(\beta_0 + x_{i1}\beta_1 + \ldots x_{ir}\beta_r\right) \\
&= x_{ij} \\
\frac{\partial}{\partial \beta_j}\log(1+\exp(x_i^\top \beta)) &= \frac{\frac{\partial}{\partial \beta_j}\exp(x_i^\top \beta)}{1+\exp(x_i^\top \beta)} \\
&= \frac{\exp(x_i^\top \beta)}{1+\exp(x_i^\top \beta)}\frac{\partial}{\partial \beta_j}(x_i^\top \beta) \\
&= p_i(\beta)x_{ij},
\end{aligned}
$$

kjer smo upoštevali $p_i = \frac{\exp x_i^\top \beta}{1+\exp x_i^\top \beta}$.

Enačbe verjetja v logističnem modelu

Sedaj potrebujemo še odvode.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \beta_j}(x_i^\top \beta) &= \frac{\partial}{\partial \beta_j}\left(\beta_0 + x_{i1}\beta_1 + \ldots x_{ir}\beta_r\right) \\
&= x_{ij} \\
\frac{\partial}{\partial \beta_j}\log(1+\exp(x_i^\top \beta)) &= \frac{\frac{\partial}{\partial \beta_j}\exp(x_i^\top \beta)}{1+\exp(x_i^\top \beta)} \\
&= \frac{\exp(x_i^\top \beta)}{1+\exp(x_i^\top \beta)}\frac{\partial}{\partial \beta_j}(x_i^\top \beta) \\
&= p_i(\beta)x_{ij},
\end{aligned}
$$

kjer smo upoštevali $p_i = \frac{\exp x_i^\top \beta}{1+\exp x_i^\top \beta}$. Iščemo torej ničlo

$$
\frac{\partial}{\partial \beta_j}L(\beta) = \sum_{i=1}^{n}\big(x_{ij}(y_i - m_i p_i(\beta))\big)
$$

za $j = 0, \ldots, r$

Enačbe verjetja v logističnem modelu

Za uporabo Newtonove metode bomo potrebovali še drugi odvod, za kar moramo izračunati še

$$\begin{aligned}\frac{\partial p_i(\beta)}{\partial \beta_k} &= \frac{\partial}{\partial \beta_k}\frac{\exp x_i^\top \beta}{1+\exp x_i^\top \beta}\\ &= x_{ik} p_i(\beta)(1-p_i(\beta))\end{aligned}$$

in sestaviti to v

$$\frac{\partial^2}{\partial \beta_j \partial \beta_k} L(\beta) = -\sum_i^n \big(x_{ij} x_{ik} m_i p_i(\beta)(1-p_i(\beta))\big)$$

za $j, k = 0, 1, \ldots, r$, kar pa lahko poenostavimo v

$$\ddot{L}(\beta) = -\sum_{i=1}^n \big(x_{ij} x_{ik} v_i(\beta)\big)$$

Enačbe verjetja v logističnem modelu

Preglednejši in priročnejši je zapis v matrični obliki:

$$\begin{aligned} L(\beta) &= y^\top \mathbf{X}\beta - m^\top \log(1 + \exp \mathbf{X}\beta) \\ \dot{L}(\beta) &= \mathbf{X}^\top (y - m \circ p(\beta)) = \mathbf{X}^\top (y - m \circ p(\beta)) = X^\top (y - \mu(\beta)) \end{aligned}$$

Za drugi odvod definirajmo diagonalno matriko $v(\beta) = \mathrm{diag}\{m_1 p_1(1 - p_1), \ldots, m_n p_n (1 - p_n)\}$ in povzemimo

$$\ddot{L}(\beta) = -\mathbf{X}^\top v(\beta)\mathbf{X}$$

Fisher scoring za logistični model

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_{i+1} &= \hat{\beta}_i + (X^T v(\hat{\beta}_i) X)^{-1} X^T (y - \mu(\hat{\beta}_i)) \\
&= \hat{\beta}_i + (\text{inverz info})(\text{score})
\end{aligned}
$$

Fisher scoring za logistični model

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_{i+1} &= \hat{\beta}_i + (X^T v(\hat{\beta}_i) X)^{-1} X^T (y - \mu(\hat{\beta}_i)) \\
&= \hat{\beta}_i + \text{(inverz info)(score)}
\end{aligned}
$$

Računanju inverza se izognemo z uvedbo premikov:

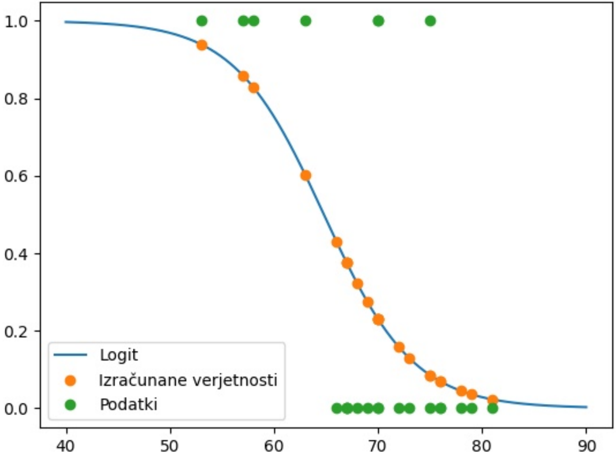
$$
\begin{aligned}
h &= \hat{\beta}_{i+1} - \hat{\beta}_i \\
X^T v(\hat{\beta}_i) X &= h * X^T (y - \mu(\hat{\beta}_i))
\end{aligned}
$$

function oceniParametre(iteracije, X, Y, $\beta_{zacetni}$, ϵ)

$p = \frac{\exp(X^\top \beta_{star})}{1+\exp(X^\top \beta_{star})}$
$V = p(1-p)$
$Score = X^\top (Y - p)$
$Info = X^\top V X$
Reši sistem na h: $Info * h = Score$
$\beta_{star} = \beta_{zacetni}$
$\beta_{nov} = \beta_{star} + h$
while $i \leq iteracije$ **do**
  if $\beta_{nov} - \beta_{star} \geq \epsilon$ **then**
    $p = \frac{\exp(X^\top \beta_{nov})}{1+\exp(X^\top \beta_{nov})}$
    $V = p(1-p)$
    $Score = X^\top (Y - p)$
    $Info = X^\top V X$
    Razreši na h: $Info * h = Score$
    $\beta_{star} = \beta_{nov}$
    $\beta_{nov} = \beta_{star} + h$
  else
    Dosegli smo želeno natančnost v zadostnem številu korakov
return β_{nov}
  end if
end while

Challenger podatki

$$p = \frac{e^{15.04290 - 0.23216x}}{1 + e^{15.04290 - 0.23216x}}$$



Kaj še bom naredil

- Ne-kanonični modeli (npr. *probit* za direktno primerjavo)
- Razširitev numeričnega dela