Trabajo Práctico Final

Introducción a la Estadística y la Ciencia de Datos, 1er Cuatrimeste 2024. Universidad de Buenos Aires

Alan Erdei, Nicolás Ian Rozenberg

2024-07-12

1. Sección Teórica

(a)

Demostraremos que el predictor derivado del estimador de Nadaraya-Watson de la esperanza condicional

$$\hat{Y}_i = E(\widehat{Y|X} = X_i), 1 \le i \le n$$

de la forma

$$\hat{\boldsymbol{Y}} = \begin{pmatrix} \hat{Y}_1 & \hat{Y}_2 & \cdots & \hat{Y}_n \end{pmatrix}^T$$

donde

$$\hat{Y}_i = \hat{m_h}(X_i)$$

es una transformación aplicada sobre ${\bf Y}.$

$$\hat{Y}_i = \hat{m}_h(X_i) = \sum_{j=1}^n Y_j w_{j,h}(X_i)$$

$$= \begin{pmatrix} w_{1,h}(X_i) & w_{2,h}(X_i) & \cdots & w_{n,h}(X_i) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}$$

Por lo tanto

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \hat{Y}_1 \\ \hat{Y}_2 \\ \vdots \\ \hat{Y}_n \end{pmatrix}}_{\hat{\mathbf{Y}}} = \underbrace{\begin{pmatrix} w_{1,h}(X_1) & w_{2,h}(X_1) & \cdots & w_{n,h}(X_1) \\ w_{1,h}(X_2) & w_{2,h}(X_2) & \cdots & w_{n,h}(X_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{1,h}(X_n) & w_{2,h}(X_n) & \cdots & w_{n,h}(X_n) \end{pmatrix}}_{S} \underbrace{\begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix}}_{\mathbf{Y}}$$

Entonces obtuvimos una transformación lineal en Y, como se quería ver.

(b)

El metodo de validación cruzada tiene como función objetivo a:

$$CV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \widehat{m_h}^{-i}(X_i))^2$$

para la minimizacion en h, donde el estimador $\widehat{m_h}^{-i}(.)$ se computa de la siguiente manera:

$$\widehat{m_h}^{-i}(x) = \sum_{j=1, j \neq i}^{n} Y_j \frac{g_j(x)}{\sum_{t=1, t \neq i}^{n} g_t(x)}$$

Donde, para mayor legibilidad en las cuentas que vendran, escribimos

$$g_j(x) = K\left(\frac{X_j - x}{h}\right)$$

Notar que el estimador $\widehat{m_h}^{-i}(.)$ se computa como en la igualdad (1) del enunciado, pero sin la i-esima observacion, (X_i, Y_i) . En todo lo que sigue, tomaremos un $i \leq n$ fijo. Dado que este i es arbitrario, lo siguiente que probaremos sera valido para la validación cruzada sacando cualquiera de las observaciones.

Queremos probar la igualdad (2):

$$\widehat{m_h}^{-i}(X_i) = \frac{\widehat{m_h}(X_i) - Y_i w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)}$$

Donde, en concordancia con la notacion del enunciado, llamamos:

$$w_{i,h}(x) = \frac{g_i(x)}{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)}$$

Para probar (2), notemos que tenemos a $\widehat{m_h}^{-i}(x)$ escrito como una sumatoria sobre j=1,2,..,n con $j\neq i$. Estamos sumando Y_j mutiplicado por una fraccion, analizamos esa fraccion:

$$\frac{g_j(x)}{\sum_{t=1, t \neq i}^{n} g_t(x)} = \frac{g_j(x)}{-g_i(x) + \sum_{t=1}^{n} g_t(x)}$$

Multiplicamos por un 1 convenientemente escrito. Es decir, $\sum_{t=1}^{n} g_t(x)$ sobre si mismo:

$$\frac{g_j(x)}{-g_i(x) + \sum_{t=1}^n g_t(x)} = \frac{g_j(x)}{\sum_{t=1}^n g_t(x)} * \frac{\sum_{t=1}^n g_t(x)}{-g_i(x) + \sum_{t=1}^n g_t(x)} = w_{j,h}(x) * \frac{\sum_{t=1}^n g_t(x)}{-g_i(x) + \sum_{t=1}^n g_t(x)}$$

Notar que el segundo multiplicando no depende de j. Reescribamos a este multiplicando con una expresion mas amigable:

$$\frac{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)}{-g_i(x) + \sum_{t=1}^{n} g_t(x)} = \left(\frac{-g_i(x) + \sum_{t=1}^{n} g_t(x)}{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)}\right)^{-1} = \left(-\frac{g_i(x)}{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)} + \frac{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)}{\sum_{t=1}^{n} g_t(x)}\right)^{-1} = (-w_{i,h}(x) + 1)^{-1}$$

Ahora si, con esta informacion, podemos reescribir a $\widehat{m_h}^{-i}(.)$ como:

$$\widehat{m_h}^{-i}(x) = \sum_{j=1, j \neq i}^n Y_j \frac{g_j(x)}{\sum_{t=1, t \neq i}^n g_t(x)} = \sum_{j=1, j \neq i}^n Y_j \frac{w_{j,h}(x)}{1 - w_{i,h}(x)}$$

Sacamos convenientemente el divisor de la fraccion, que no depende de j, de la sumatoria:

$$\widehat{m_h}^{-i}(x) = \frac{1}{1 - w_{i,h}(x)} \sum_{j=1, j \neq i}^{n} Y_j * w_{j,h}(x)$$

Sabiendo que $\widehat{m}_h(x) = \sum_{j=1}^n Y_j * w_{j,h}(x)$, podemos reescribir la sumatoria de arriba como

$$\widehat{m_h}(x) - Y_i * w_{i,h}(x) = \sum_{j=1, j \neq i}^n Y_j * w_{j,h}(x)$$

Finalmente, juntando todo lo recien visto y evaluando $\widehat{m_h}^{-i}(x)$ en X_i , probamos la igualdad (2)

$$\widehat{m_h}^{-i}(X_i) = \frac{\widehat{m_h}(X_i) - Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)}$$

Para probar la igualdad (3), que establece que

$$CV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{(Y_i - \widehat{m}_h(X_i))^2}{(1 - w_{i,h}(X_i))^2}$$

reemplazaremos lo obtenido en (2) en la definición de CV(h) que enunciamos al principio.

$$CV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \widehat{m_h}^{-i}(X_i))^2 =$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \frac{\widehat{m_h}(X_i) - Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} \right)^2$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{Y_i * (1 - w_{i,h}(X_i))}{1 - w_{i,h}(X_i)} - \frac{\widehat{m_h}(X_i) - Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} \right)^2$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{Y_i - Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} - \frac{\widehat{m_h}(X_i) - Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} \right)^2$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{Y_i - Y_i * w_{i,h}(X_i)) - \widehat{m_h}(X_i) + Y_i * w_{i,h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} \right)^2$$

$$= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{Y_i - \widehat{m_h}(X_i)}{1 - w_{i,h}(X_i)} \right)^2$$

Que es lo que queriamos probar. ■

2. Sección Práctica

(a)

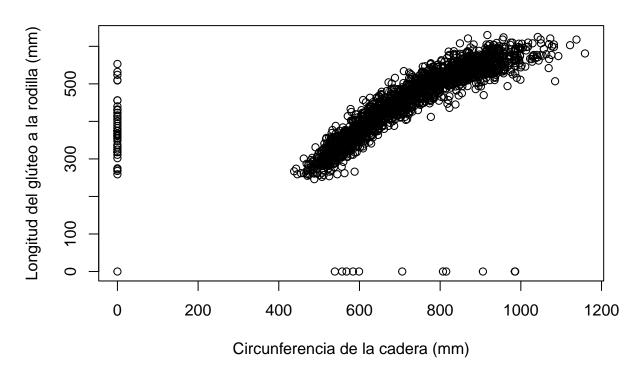
Cargamos los datos

```
datos <- read.csv("individuals.csv", sep=";")
poblacion_femenina <- datos[datos$SEX == 2,]
attach(poblacion_femenina)</pre>
```

Primer gráfico de dispersión de Circunferencia de la cadera (HIP.CIRCUMFERENCE) (eje x) vs. Longitud del glúteo a la rodilla (BUTTOCK.KNEE.LENGTH) (eje y)

```
plot(
   HIP.CIRCUMFERENCE, BUTTOCK.KNEE.LENGTH,
   main = "Gráfico de dispersión",
   xlab = "Circunferencia de la cadera (mm)",
   ylab = "Longitud del glúteo a la rodilla (mm)"
)
```

Gráfico de dispersión

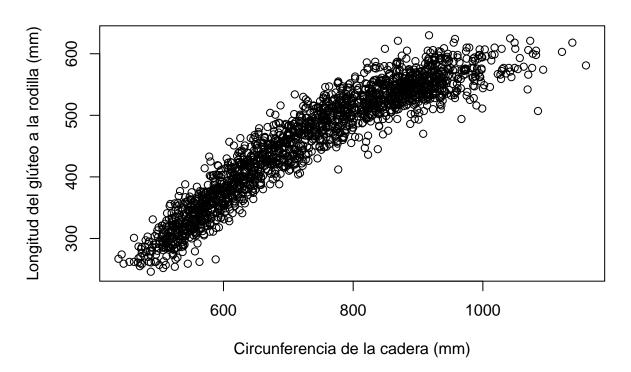


Se pueden observar puntos donde o bien la primera variable es 0, o bien la segunda lo es. Podemos interpretar que se desconoce el valor. Graficamos las mismas variables quitando dichos puntos.

```
plot(HIP.CIRCUMFERENCE[HIP.CIRCUMFERENCE != 0 & BUTTOCK.KNEE.LENGTH != 0],
    BUTTOCK.KNEE.LENGTH[HIP.CIRCUMFERENCE != 0 & BUTTOCK.KNEE.LENGTH != 0],
```

```
main = "Gráfico de dispersión",
    xlab = "Circunferencia de la cadera (mm)",
    ylab = "Longitud del glúteo a la rodilla (mm)"
)
```

Gráfico de dispersión



Este gráfico sugiere una correlación positiva entre la circunferencia de la cadera y la longitud del femur. Eliminamos los datos que posean 0 en estas columnas.

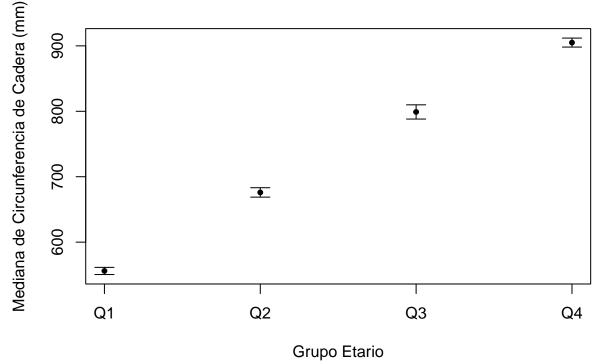
```
poblacion_femenina <- poblacion_femenina[
  HIP.CIRCUMFERENCE != 0 & BUTTOCK.KNEE.LENGTH != 0,
]
attach(poblacion_femenina)</pre>
```

(b)

Separamos a la población femenina en grupos etarios de acuerdo al cuartil, y calculamos intervalo de confianza bootstrap de nivel aproximado 0.95. Para cada grupo, calculamos la mediana muestral y generamos un número (n_bootstrap, 1000) de muestras bootstrap. Cada muestra bootstrap se obtiene al seleccionar observaciones aleatoriamente con reemplazo del conjunto de datos original del grupo. Para cada una de estas muestras bootstrap, calculamos la mediana de HIP.CIRCUMFERENCE, y el intervalo de confianza normal bootstrap, utilizando el resultado de que la distribución asintótica de la mediana muestral es normal. Para calcular este intervalo, estimamos el error estándar muestral mediante bootstrap, utilizando las medianas calculadas para cada muestra bootstrap.

```
quartiles <- quantile(poblacion_femenina$AGE.IN.MONTHS, probs = c(0.25, 0.5, 0.75))
poblacion_femenina$group <- cut(</pre>
  AGE. IN. MONTHS,
  breaks = c(-Inf, quartiles, Inf),
  labels = c("Q1", "Q2", "Q3", "Q4")
ic_bootstrap <- function(data, n_bootstrap = 1000, conf_level = 0.95) {</pre>
  sample median <- median(data)</pre>
  medians <- c()
  for (i in 1:n_bootstrap){
    medians <- c(medians, median(sample(data, replace = TRUE)))</pre>
  se_bootstrap <- sqrt((1/n_bootstrap)*sum((medians-mean(medians))^2))</pre>
  z_alpha <- qnorm((1 - conf_level) / 2, lower.tail = FALSE)</pre>
  lower_bound <- sample_median - z_alpha*se_bootstrap</pre>
  upper_bound <- sample_median + z_alpha*se_bootstrap</pre>
  list(median = sample_median, lower = lower_bound, upper = upper_bound)
results <- lapply(
  split(HIP.CIRCUMFERENCE, poblacion_femenina$group), ic_bootstrap
for (i in 1:4) {
  cat("Grupo", names(results)[i], "\n")
  cat("Mediana:", results[[i]]$median, "\n")
  cat("Intervalo de confianza:", results[[i]]$lower, "-", results[[i]]$upper, "\n\n")
}
## Grupo Q1
## Mediana: 556
## Intervalo de confianza: 550.5297 - 561.4703
## Grupo Q2
## Mediana: 676
## Intervalo de confianza: 668.8075 - 683.1925
##
## Grupo Q3
## Mediana: 799
## Intervalo de confianza: 788.127 - 809.873
## Grupo Q4
## Mediana: 905
## Intervalo de confianza: 898.1276 - 911.8724
Graficamos los resultados
groups <- names(results)</pre>
medians <- sapply(results, function(x) x$median)</pre>
```

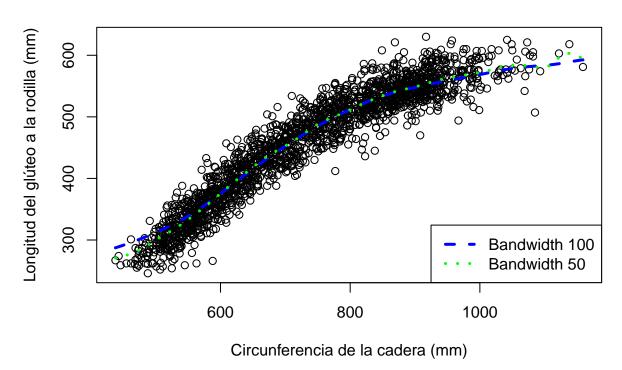
Medianas de Circunferencia de Cadera por Grupos Etarios



(c)

Agregamos las líneas de regresión al diagrama de dispersión original.

Gráfico de dispersión integrando regresión no paramétrica ksmoot



Observando el gráfico es difícil de determinar cuál de las dos ventanas usaríamos. La ventana de 50 ajusta mejor que la ventana de 100 para los datos de circunferencia de cadera más pequeños. Sin embargo, varía más para los datos más altos, por lo que perdería estabilidad si nos interesa predecir valores altos. Ahora aplicamos validación cruzada Leave One Out para ksmooth. Por ahora no aplicamos el criterio demostrado en el apartado teórico.

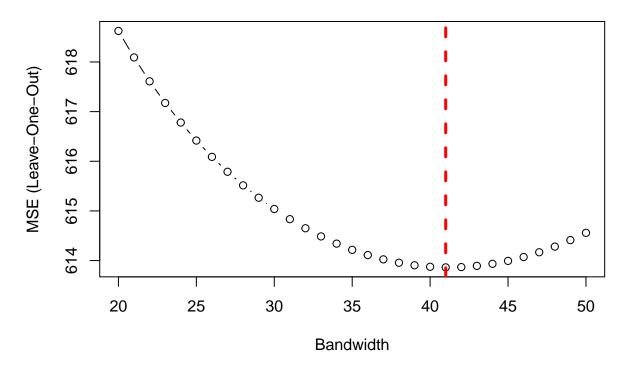
```
loo_mse <- function(bandwidth) {
    n <- length(X)
    mse <- 0

for (i in 1:n) {
        X_train <- X[-i]
        Y_train <- Y[-i]
        smooth <- ksmooth(X_train, Y_train, kernel = "normal", bandwidth = bandwidth, x.points = X[i])
        mse <- mse + (Y[i] - smooth$y)^2
    }

    return(mse / n)
}

# Búsqueda de la ventana óptima en la grilla de 20 a 50 con paso 1</pre>
```

Búsqueda de Ventana Óptima para ksmooth



```
cat("La ventana óptima obtenida es", optimal_bandwidth)
```

La ventana óptima obtenida es 41

Ahora, implementamos manualmente el estimador de Nadaraya-Watson con kernel gaussiano

```
# Función para el estimador de Nadaraya-Watson
nwsmooth <- function(x, X, Y, h) {
    K <- function(u) dnorm(u)
    n <- length(X)
    m <- numeric(length(x))

# Si x == X, weights_matrix corresponde a la matriz asociada con
    # la transformación lineal de Nadaraya-Watson
    weights_matrix <- matrix(nrow = length(x), ncol = n)</pre>
```

```
for (i in 1:length(x)) {
   weights_matrix[i, ] <- K((X - x[i]) / h)
   weights_matrix[i, ] <- weights_matrix[i, ] / sum(weights_matrix[i, ])
   m[i] <- sum(weights_matrix[i, ] * Y)
}

return(list(m = m, weights = weights_matrix))
}</pre>
```

Y ahora realizamos validación cruzada leave-one-out. Ahora sí, utilizando el criterio del apartado teórico.

```
loo_mse_nw <- function(bandwidth) {
    n <- length(X)
    nw_response <- nwsmooth(X, X, Y, bandwidth)
    Y_hat <- nw_response$m
    weights <- nw_response$weights
    mse <- 0

for (i in 1:n){
    mse <- mse + (Y[i]-Y_hat[i])^2 / (1 - weights[i, i])^2
}

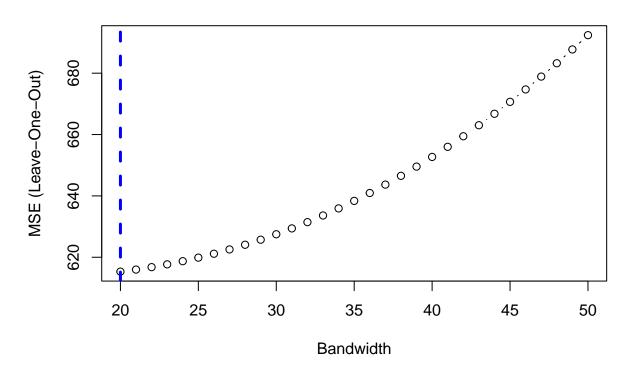
mse <- mse / n

return(mse)
}

mse_values_nw <- sapply(bandwidths, loo_mse_nw)

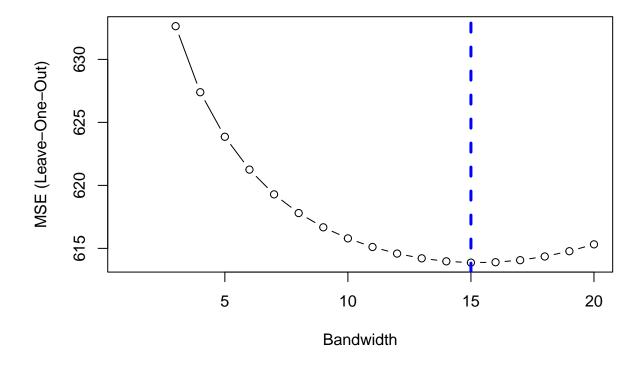
optimal_bandwidth_nw <- bandwidths[which.min(mse_values_nw)]
plot(bandwidths, mse_values_nw, type = "b", main = "Búsqueda de Ventana Óptima para Nadaraya-Watson",
    xlab = "Bandwidth", ylab = "MSE (Leave-One-Out)")
abline(v = optimal_bandwidth_nw, col = "blue", lwd = 3, lty = 2)</pre>
```

Búsqueda de Ventana Óptima para Nadaraya-Watson



La función objetivo se ve distinta a cuando aplicamos ksmooth. Ahora la ventana óptima es un extremo de la grilla. Crearemos una nueva grilla corrida hacia la izquierda, con ventanas que poseen valores que van de 1 a 20

Búsqueda de Ventana Óptima para Nadaraya-Watson

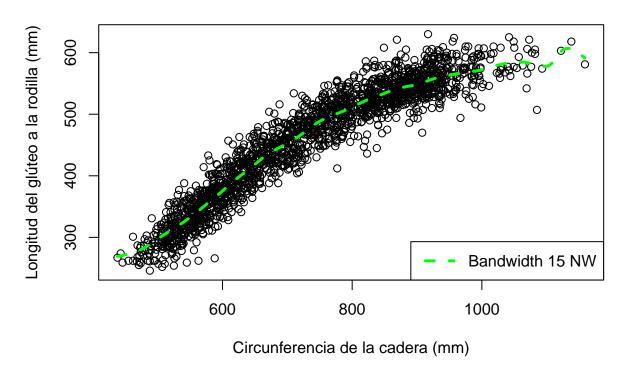


Ahora el óptimo en nuestra grilla no se encuentra en un extremo, por lo que podemos quedarnos con dicho valor.

```
cat("La ventana óptima obtenida es", optimal_bandwidth_nw)
```

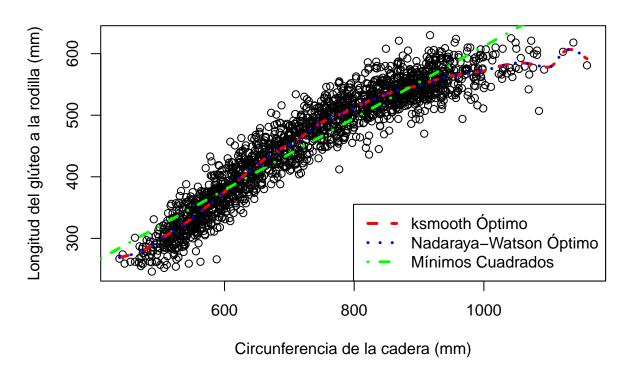
La ventana óptima obtenida es 15

Gráfico de dispersión integrando regresión no paramétrica ksmoot



Ahora nos falta realizar un gráfico viendo cómo queda la regresión obtenida por cuadrados mínimos, y por las mejores ventanas tanto de ksmooth como de nwsmooth (iv)

Gráfico de dispersión integrando regresión no paramétrica nwsmoo



Observamos que ksmooth y nwsmooth se comportan de forma prácticamente idéntica en sus ventanas óptimas, mientras que el ajuste lineal mediante cuadrados mínimos se diferencia considerablemente. Sólo observando el gráfico, consideramos que un enfoque no paramétrico podría servir más para realizar un modelo de regresión con estos datos. Se puede observar un sesgo mucho menor de los modelos no paramétricos que el ajuste lineal. Considerando que existe cierto cambio en la correlación entre las dos variables, cualquiera de los dos modelos no paramétricos podría servir para predecir mejor dichas situaciones. La única desventaja que observamos, para los valores más altos, donde hay menos datos, tiende a subreajustar, aunque no de forma muy importante. Calculemos los R^2 (coeficiente de determinación) para cada modelo.

```
cat("R^2 modelo lineal", summary(fit_lm)$r.squared)
```

R^2 modelo lineal 0.887662

```
calcular_r2 <- function(Y_real, Y_hat_ksmooth){
   ss_total <- sum((Y_real - mean(Y))^2)
   ss_res_ksmooth <- sum((Y_real - Y_hat_ksmooth)^2)
   rsq <- 1 - (ss_res_ksmooth / ss_total)
   return(rsq)
}</pre>
```

```
smooth_nw_opt <- nwsmooth(X, X, Y, optimal_bandwidth_nw)
cat("R^2 NW", calcular_r2(Y, smooth_nw_opt$m))</pre>
```

R^2 NW 0.9272791

```
cat("R^2 ksmooth", calcular_r2(sort(Y), smooth_opt$y))
```

R^2 ksmooth 0.914528

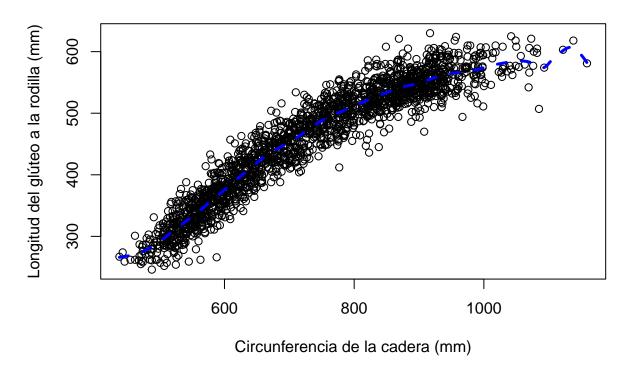
El método que mejor score R^2 tuvo es el enfoque no paramétrico con el estimador de Nadaraya Watson implementado manualmente. Por lo tanto, es el que mejor explica la variación en los datos. Sin embargo, hay que tener en consideración las observaciones previas.

(d)

Implementaremos dicho predictor (regresión local lineal) basándonos en las cuentas que se encuentran en Loader (2004, p. 4-5).

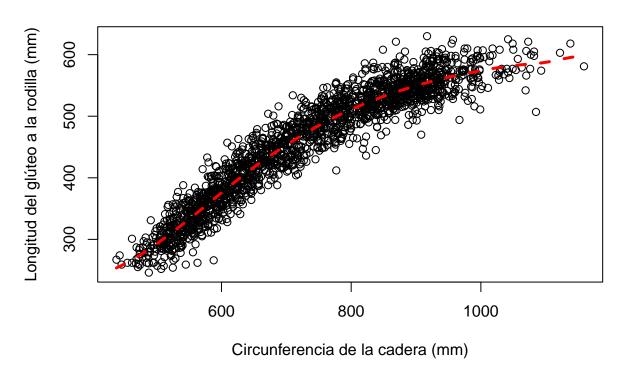
```
linearsmooth <- function(x, X, Y, h) {</pre>
  #' x: vector de valores en los que se evaluará el predictor
  #' X: vector de valores de la variable independiente
  #' Y: vector de valores de la variable dependiente
  #' h: ancho de la ventana
  K <- function(u) dnorm(u)</pre>
  n <- length(X)
  m <- numeric(length(x))</pre>
  for (i in 1:length(x)) {
    weights \leftarrow K((X - x[i]) / h)
    weights <- weights / sum(weights) # Normalize weights</pre>
    X_design <- cbind(1, X - x[i])</pre>
    W <- diag(weights)</pre>
    XtW <- t(X_design) %*% W</pre>
    M1 <- solve(XtW %*% X_design)
    M2 <- XtW %*% Y
    coefs <- M1 %*% M2
    m[i] <- coefs[1]
  return(m)
}
Y_pred <- linearsmooth(seq(min(X), max(X), length.out=500), X, Y, optimal_bandwidth_nw)
```

Gráfico de dispersión integrando regresión no paramétrica linearsmo



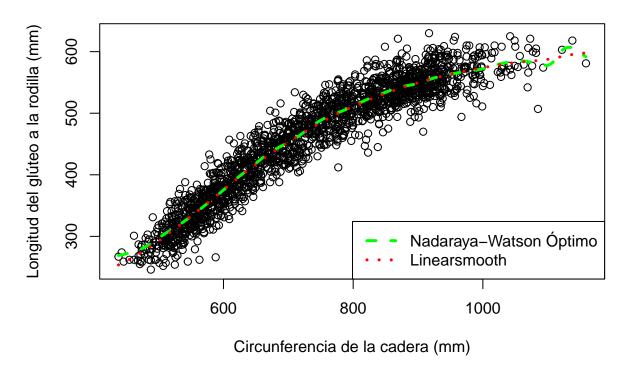
Este gráfico sugiere que la ventana no es la mejor para linearsmooth. Esto se debe a que, en valores altos, donde hay menos datos, la curva sobreajusta. Ahora aplicamos el estimador implementado recién, pero usando una ventana de h=40

Gráfico de dispersión linearsmooth, h = 40



Graficamos ahora el estimador de Nadaraya-Watson obtenida con la ventana optima del item (c)iii, en conjunto con el estimador del grafico de arriba:

Nadaraya-Watson vs linearsmooth con ventanas óptimas



Vemos que el predictor de linearsmooth con la ventana elegida parecería ser más robusto e incluso ajustar mejor que el estimador de Nadaraya-Watson. La robustez se puede observar claramente en los valores más altos. Y para los demás puntos, parecería estimar de manera más centrada en los puntos. Por lo tanto, para estos datos parecería ser un estimador menos sesgado.

Conclusión

En este trabajo práctico se evaluó el ajuste de regresión no paramétrica para las variables circunferencia de cadera y longitud del glúteo a la cadera utilizando el estimador de Nadaraya-Watson y el comando ksmooth de R con diferentes parámetros de ventana. Además, se calcularon intervalos de confianza bootstrap para la mediana de la circunferencia de cadera para cada cuartil en la población femenina de acuerdo a la edad en meses.

Inicialmente, se ajustaron dos regresiones no paramétricas con bandas de 100 y 50, mostrando diferencias en la suavidad del ajuste. Se implementó un código para la búsqueda de la ventana óptima utilizando validación cruzada leave-one-out, identificando así la mejor banda para el ajuste con ksmooth.

Posteriormente, se implementó la función nwsmooth para el cálculo del estimador de Nadaraya-Watson y se repitió la búsqueda de la ventana óptima. Finalmente, se compararon los resultados obtenidos con ambas técnicas no paramétricas y se superpusieron sobre el ajuste paramétrico tradicional.

Las comparaciones realizadas sugieren que el ajuste no paramétrico con la banda óptima proporciona un mejor ajuste a los datos en comparación con el ajuste paramétrico, capturando mejor las posibles no linealidades en la relación entre las variables. Sin embargo, la elección de la banda óptima es crucial para obtener un buen ajuste, y el método de validación cruzada se muestra como una herramienta efectiva para esta selección.

Por último, se implementó un predictor basado en regresión local lineal, donde para una ventana óptima pudimos concluir una mayor robustez y menor sesgo para el conjunto de datos, que Nadaraya Watson.

Podríamos concluir que, para este conjunto de datos, los métodos de regresión no paramétrica con la selección adecuada de la banda pueden ofrecer ventajas significativas en términos de flexibilidad y precisión en el ajuste.