

Régression non-paramétrique

Philippe Real

16/09/2019

1. Etude de la densité g des X

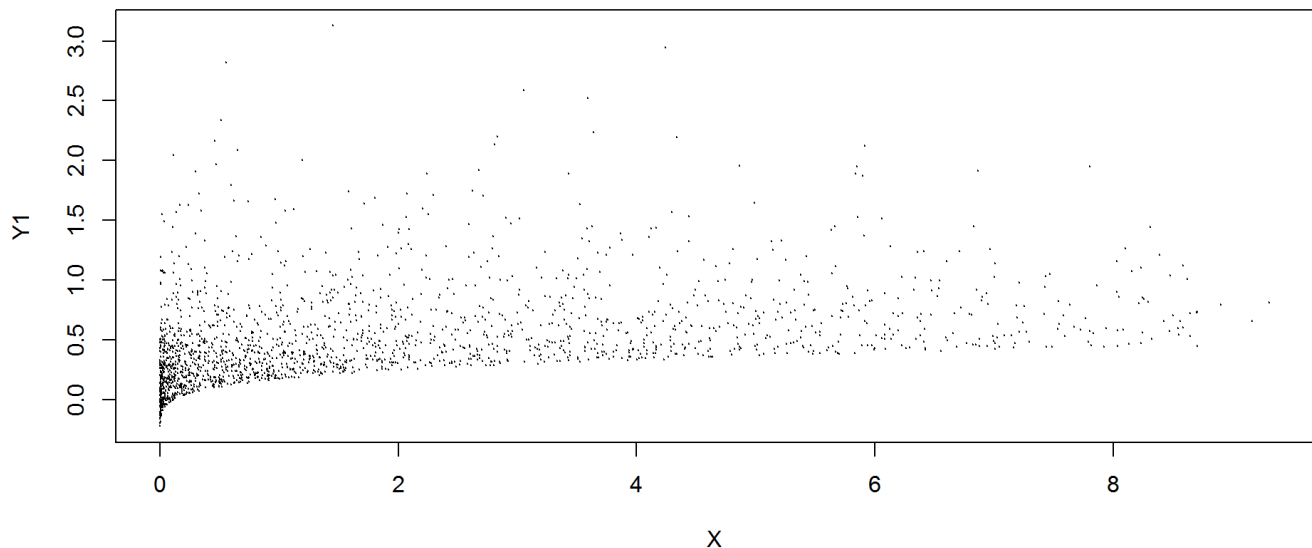
On utilise les données Data1. Jeux de données (X_i, Y_i) $i=1, \dots, 2000$

Avec la représentation suivante : $Y_i = r(X_i) + \sigma \xi_i(X_i)$ (cas homoscédastique σ ne dépend pas de X)

1.0 Lecture des données et premières analyses

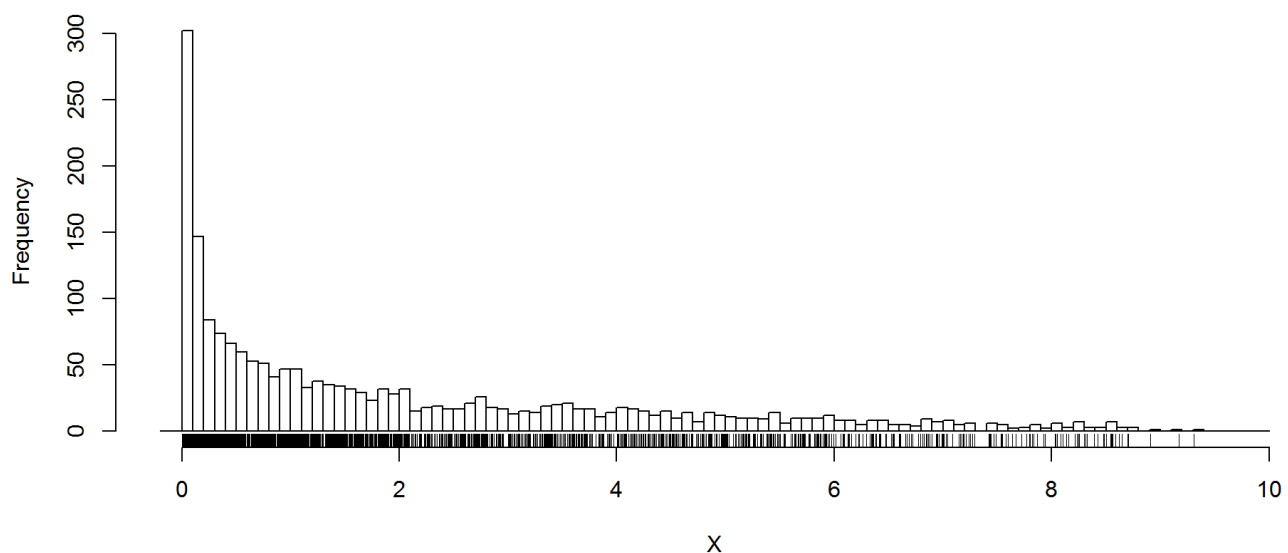
```
##      X.1      X      Y1
## Min.   : 1.0   Min.   :0.000005 Min.   : -0.2244
## 1st Qu.: 500.8 1st Qu.:0.258074 1st Qu.: 0.2619
## Median :1000.5 Median :1.192414 Median : 0.4303
## Mean   :1000.5 Mean   :2.029447 Mean   : 0.5112
## 3rd Qu.:1500.2 3rd Qu.:3.318174 3rd Qu.: 0.6735
## Max.   :2000.0 Max.   :9.308684 Max.   : 3.1263
```

Jeux de données Data1.



Pour avoir une idée de la densité de X on peut tracer son histogramme.

Histogram of X

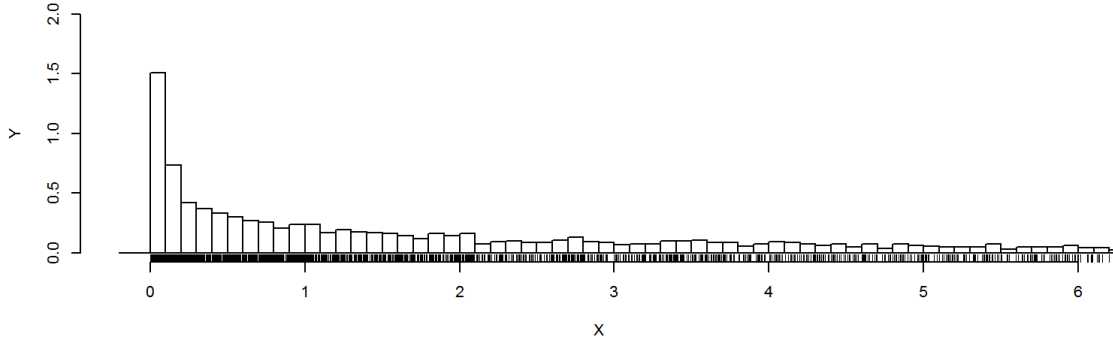


1.1 Estimateur non-paramétrique de $g(x)$

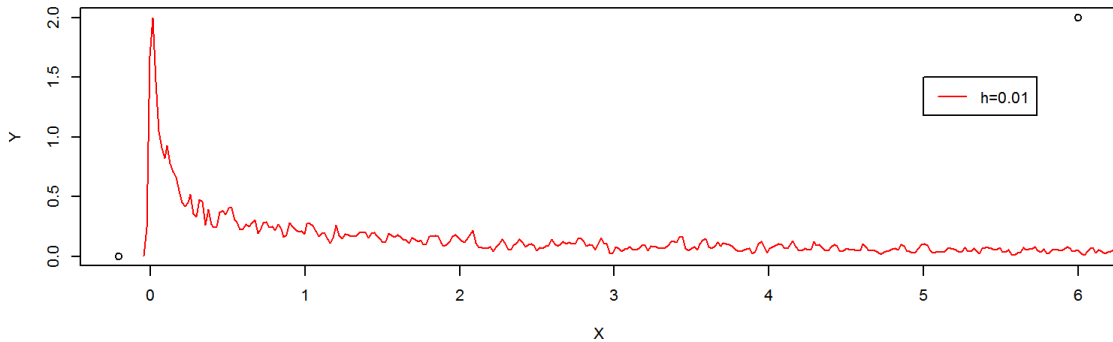
On peut utiliser la fonction `bkde` du package `KernSmooth` qui estime la densité par la méthode des noyaux. On prend comme noyau le noyau normal. Ce choix peut sembler arbitraire, mais on a vu que ce n'est pas le choix du noyau qui est le plus important dans l'estimation de la densité. On calcule cet estimateur de la densité pour différentes largeurs de fenêtre: h (bandwidth) Et on va déterminer de manière empirique une valeur de h qui semble adapté.

Graphique pour de petites valeurs de la fenêtre h : 0.01 / 0.03 / 0.05

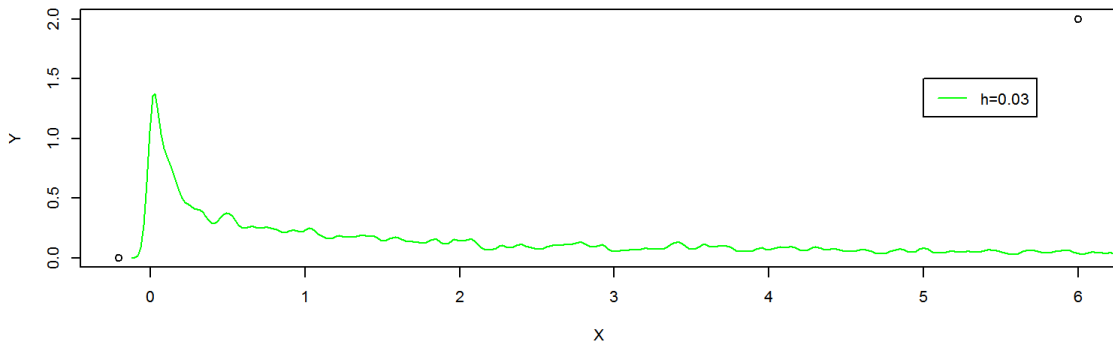
Histogramme



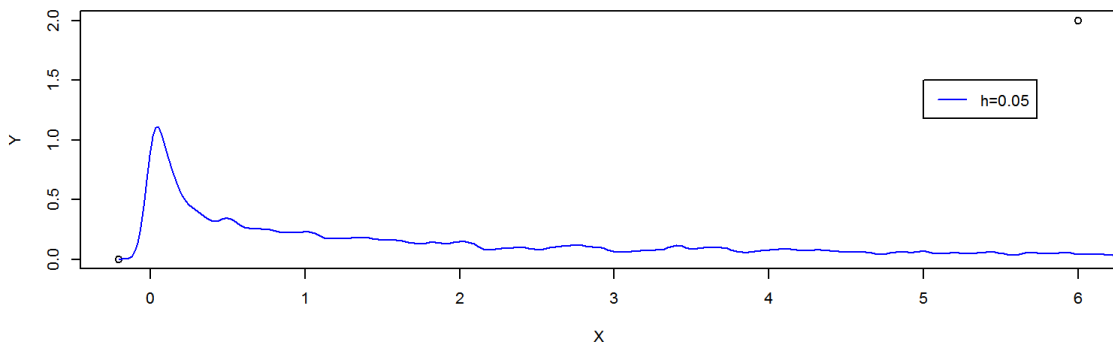
Estimation de la densité par noyaux pour $h=0.01$



Estimation de la densité par noyaux pour $h=0.03$

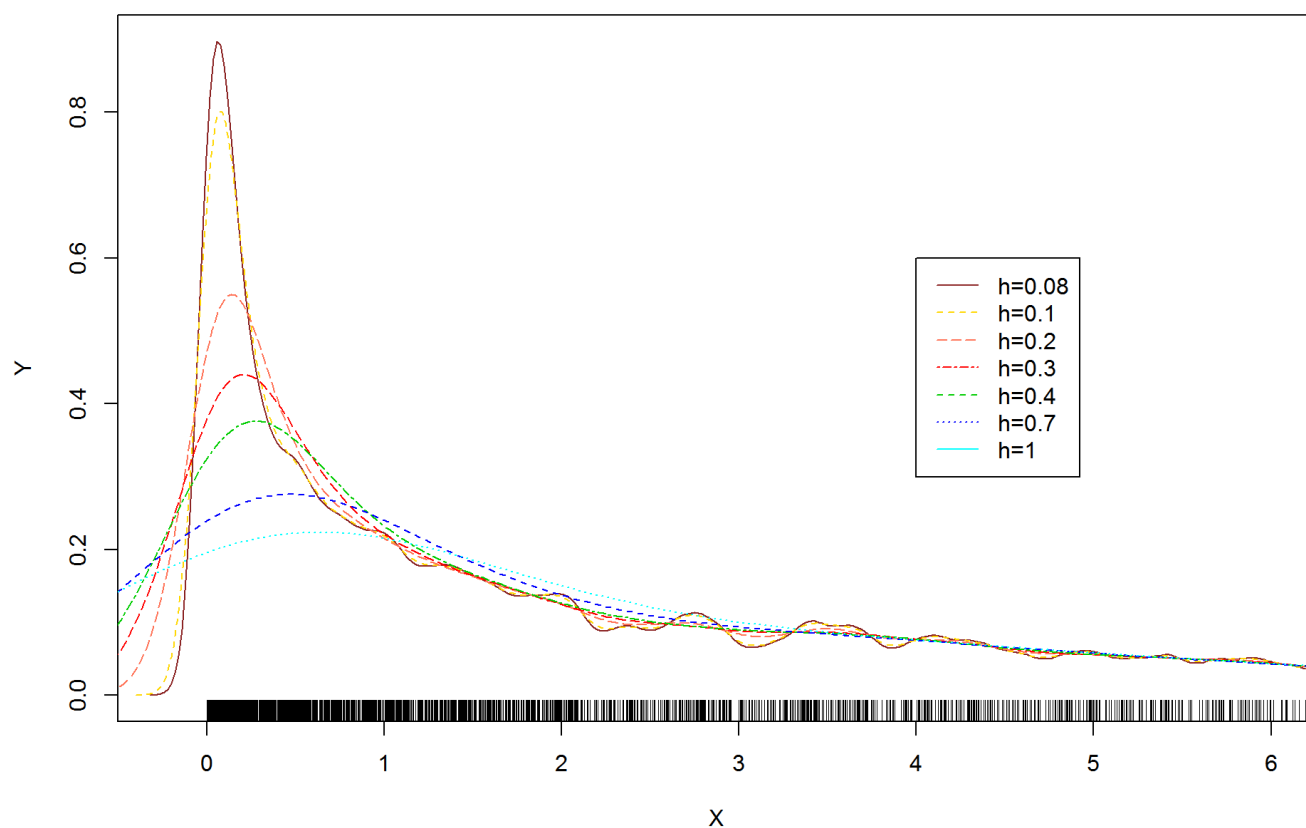


Estimation de la densité par noyaux pour $h=0.05$



On remarque de fortes oscillations pour des h entre 0.01 et 0.05.

Estimation de la densité par noyaux pour différents h



A partir de $h = 0.2$ l'approximation est plus régulière.

Raison pour laquelle ce choix est important et ce qui se produit si h est mal choisi

- Si h est trop grand (courbes bleues) noyau trop régularisant, estimateur régulier mais biaisé.
- Si h est trop petit (courbes marron du graphique ci-dessus) l'estimateur est très oscillant, la variance est importante mais le biais est faible. Il faut donc trouver un h intermédiaire, un compromis qui minimise la variance sans entraîner trop de biais. Un h compris entre 0.8 et 3 semble correct.

1.2 Détermination d'un h optimal

Représentation graphique de l'estimation par noyau de la densité ed X: $g(x)$, où h_n est la fenêtre donnée par validation croisée ou par une autre méthode que l'on précisera.

1.2.1 Validation croisée pour la densité

Utilisation de la fonction `bw.ucv` library stats

```
## [1] 0.05675136
```

1.2.2 Règle de Silverman

En appliquant la règle de Silverman, on obtient le h suivant:

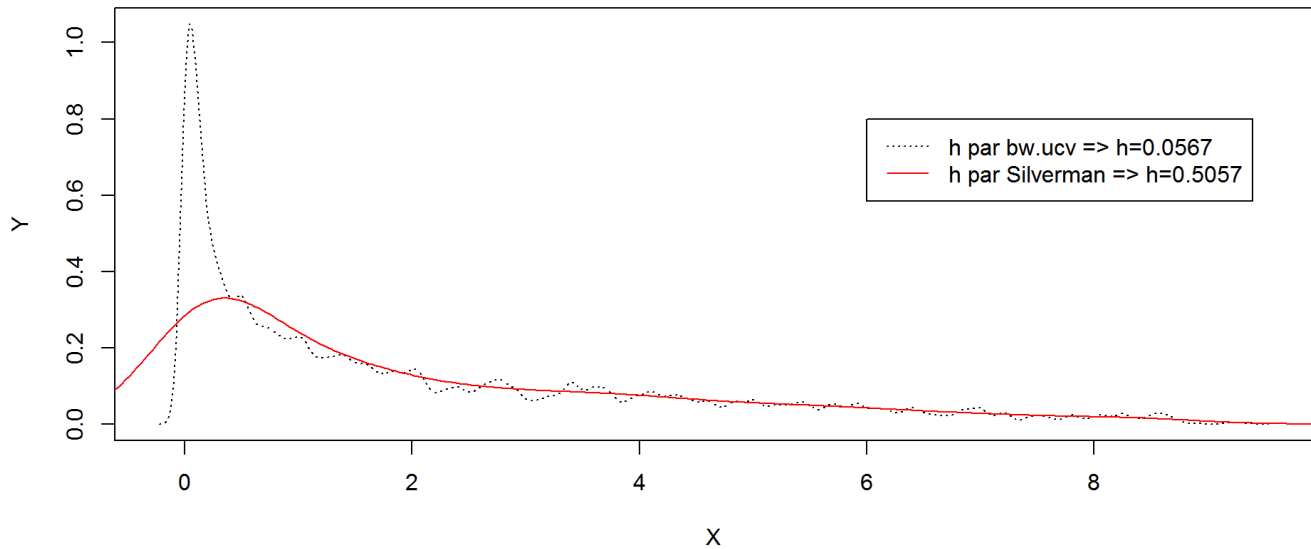
```
## [1] 0.505695
```

On obtient le même résultat avec la fonction: `bw.nrd`

Fonction `bw.nrd`

```
## [1] 0.505695
```

Estimateurs par noyaux gaussien de la densité g des X et différents h.



1.2.3 Méthodes alternatives

Fonction density

On peut regarder le résultat de la fonction `density` du package `RSmooth` qui teste différents noyaux et renvoie un h optimal

```
## [1] 0.4293637
```

Fonction dpik

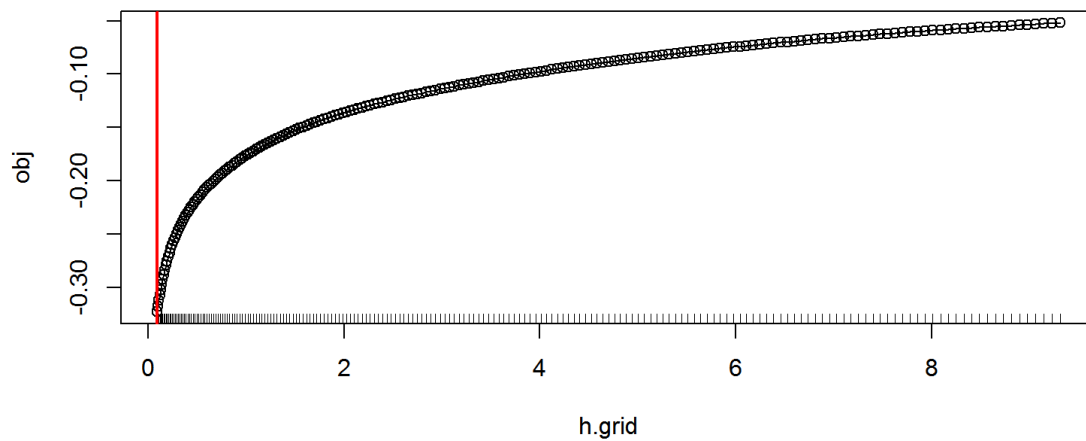
méthode du package `Kersmooth`: pour la selection d'une fenêtre optimale

```
## [1] 0.1439489
```

Fonction ucv recodée

La fenêtre h est obtenu par (UCV) de Least Squares Cross-Validation curve (LSCV) et h obtenu (UCV)

Least Squares Cross-Validation curve (LSCV) et h obtenu (UCV)

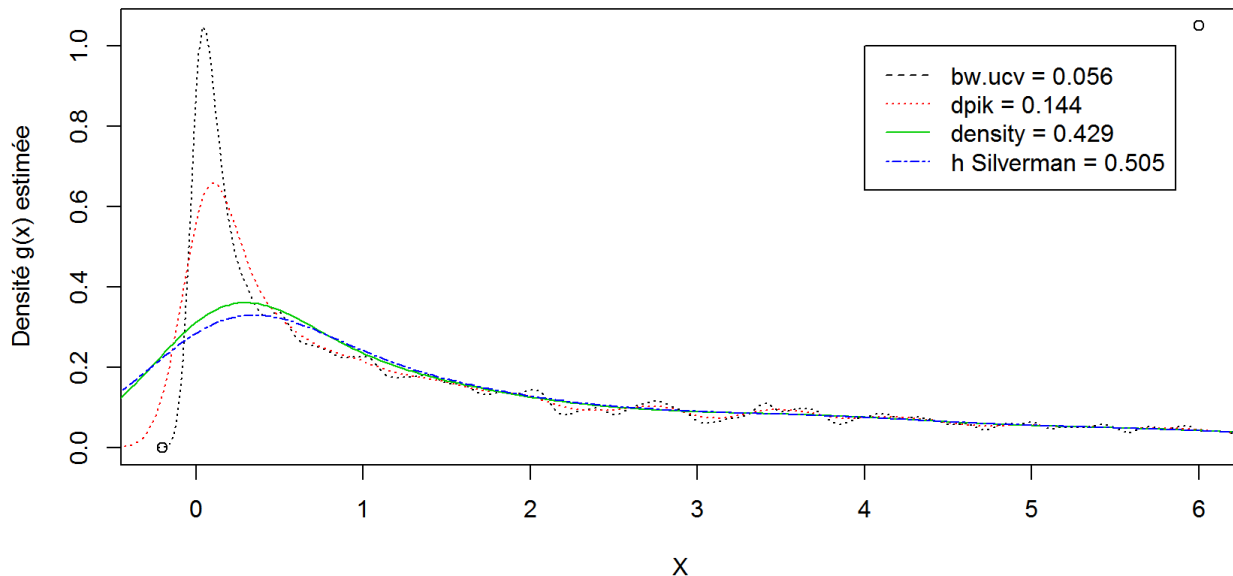


```
## [1] 0.09308678
```

Résumé des résultats

Méthode	valeur de h
bw.ucv	0.0567514
ucv recodée	0.0930868
dpik	0.1439489
density	0.4293637
Regle Silverman	0.505695

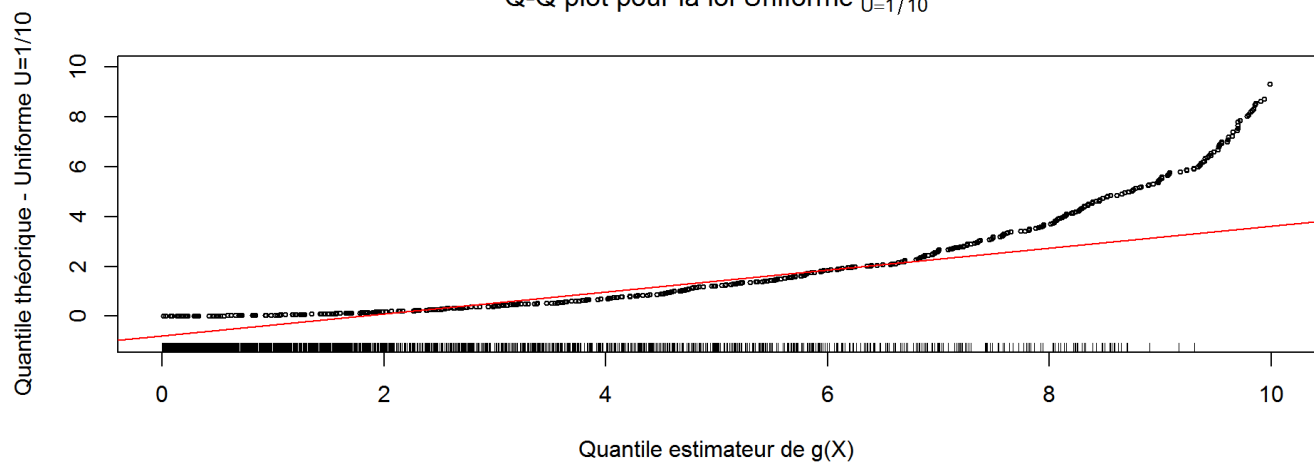
Estimateurs par noyaux gaussien de la densité g des X pour différents h



1.3 QQPlot - g(x) densité Uniforme

Implementation d'un QQ-plot pour vérifier empiriquement l'hypothèse g(x) suit (ou pas) une densité Uniforme $U=1/10$ sur $[0,10]$

Q-Q plot pour la loi Uniforme $U=1/10$



A la vue du graphique QQPlot par rapport à la loi uniforme ($U=1/10$) l'hypothèse selon laquelle g est uniforme n'est pas valide. En particulier dans la zone où X est entre 0 et 2 et où X est au delà de 6. La densité des individus est faible sur la dernière zone ($X>6$) mais à contrario très importante pour ($X<2$). On ne peut donc accepter l'hypothèse.

1.4 Zone de l'espace où l'estimation de r sera plus précise

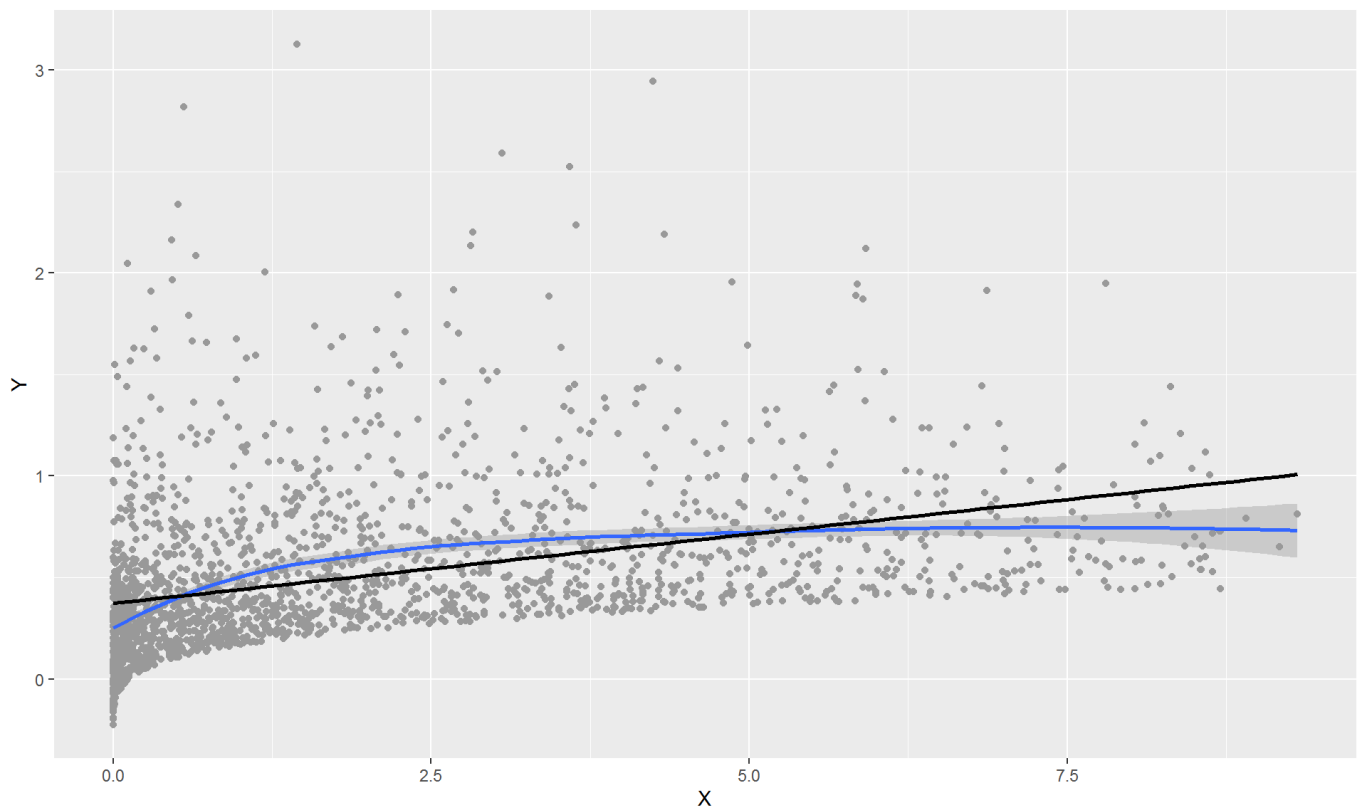
On aura plus de précision où la densité des données est importante. Le quantile à 90% se situe au point $x=5.461349$. On a une répartition de 90% des données sur la 1ère moitié de l'intervalle: $[0+\text{dela}, 5.46]$. La variance ne dépend pas de X et semble assez constante. Donc plus de précision dans l'intervalle $[0+\text{dela}, 5.46]$. La précision diminue ensuite (sur l'axe des abscisses à droite). Trop proche de 0 l'estimation n'est pas précise non plus: difficulté d'estimer où $g(x) = 0$.

2. Reconstruction de $r(x)$

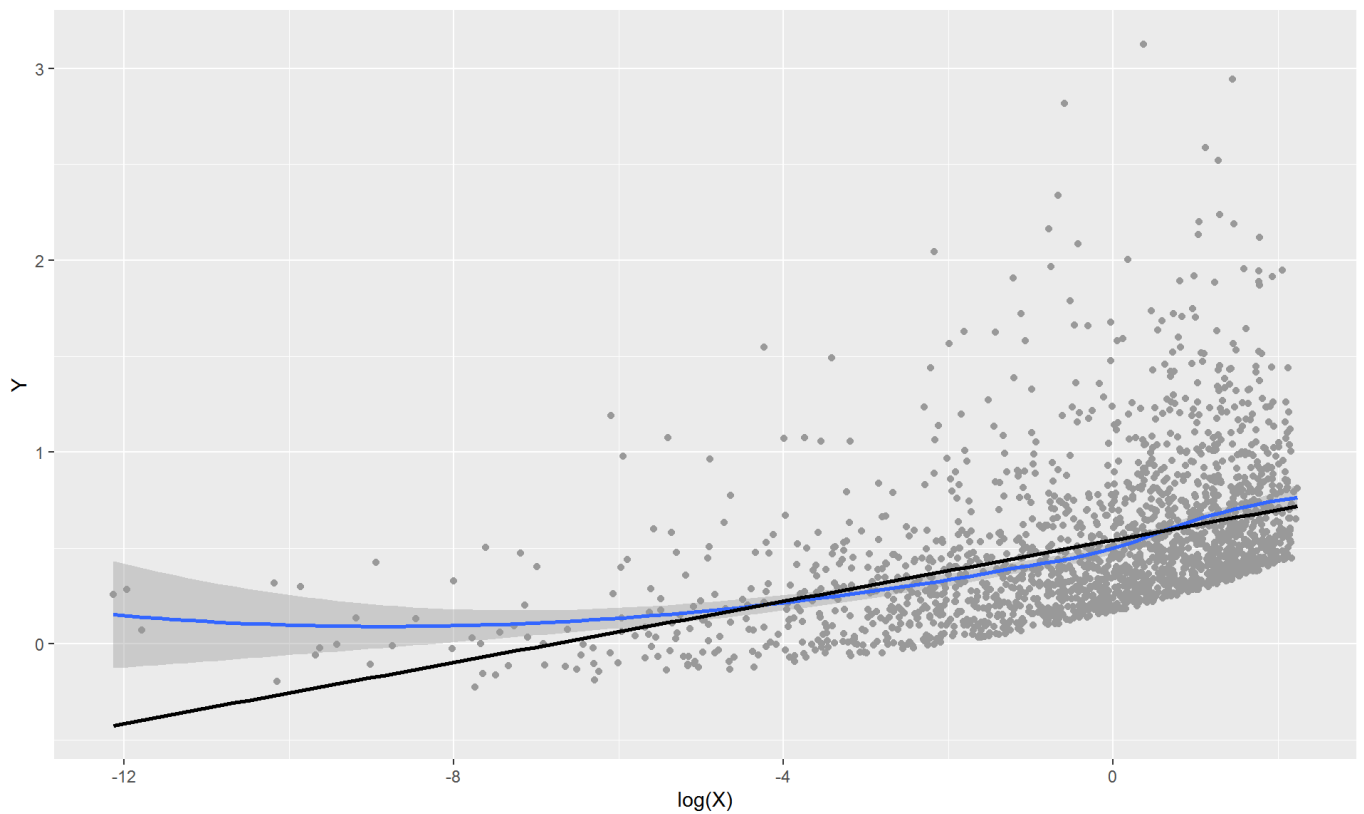
On est dans le cadre de l'estimation non paramétrique, on reprend les hypothèses classiques On utilise les données de Data1, (X,Y)

2.1 Linéarité de la fonction r

On trace Y_1 en fonction de X . Sans transformation, à la vue du graphe, r ne peut être linéaire.



Maintenant On trace Y_1 en fonction de $\log(X)$



Dans la région $[-5,1]$ où l'on retrouve la quasi totalité de l'échantillon, la transfoarmtion $(\log(x))$ a permis de bien linéariser.

2.2. Construction d'un estimateur non-parametrique de $r(x)$

Détermination de la fenêtre h

Différentes fenêtres h obtenues à partir de différentes méthodes: fonction `dpill` de R, h de Silverman, validation croisée.

```
## [1] "h_dpill : 0.218684860290525 h_silver : 0.505695020156574 h_CV1 ; 0.337185929648241 h_CV2 ; 0.120060113212087"
```

Test: choix de h local

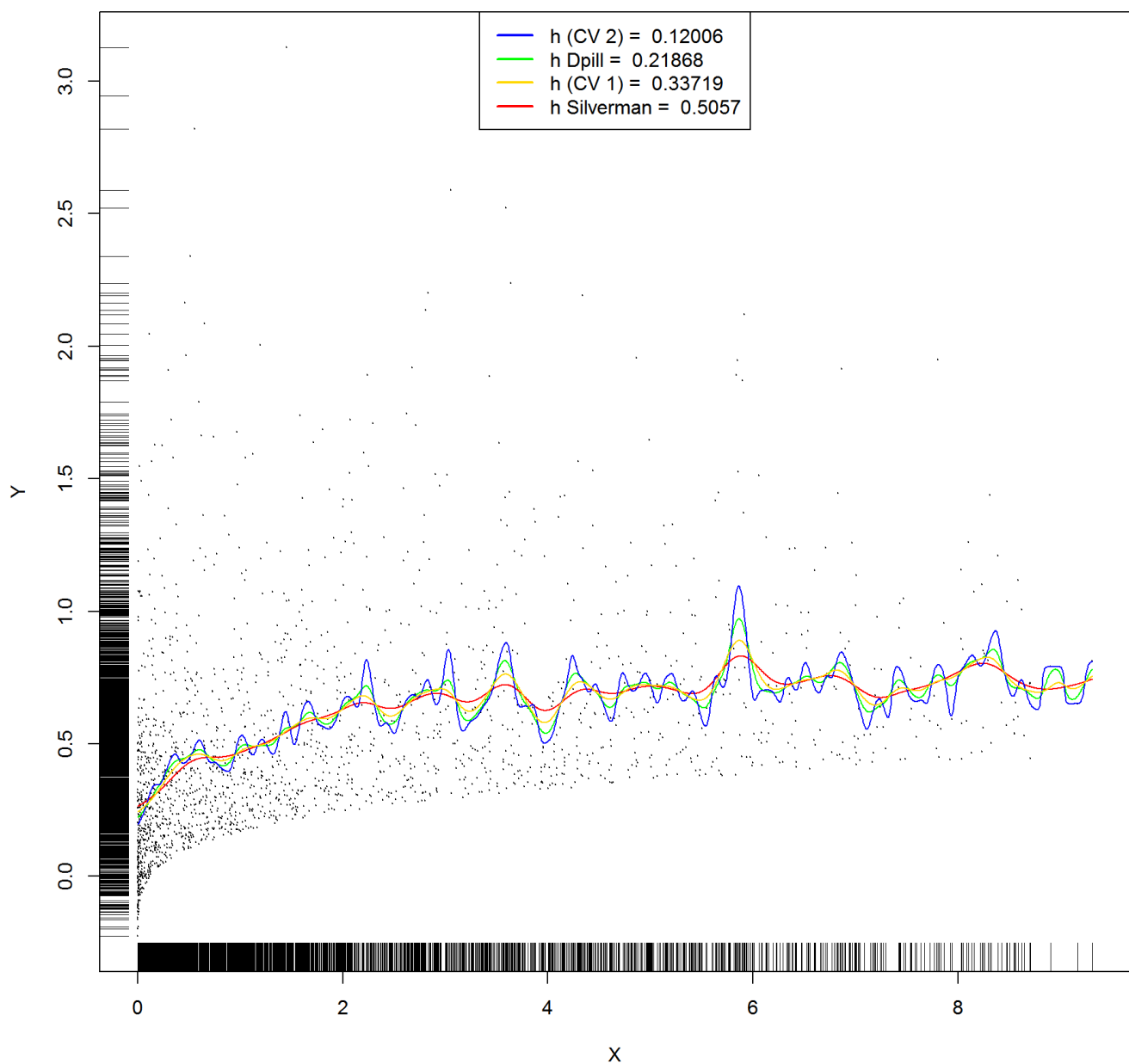
```
##      Min.   1st Qu.   Median     Mean  3rd Qu.     Max.
## 0.005019 0.014504 0.036759 0.059364 0.078701 0.173141
```

On remarque que, la valeur médiane 0.036759 est assez proche du résultat trouvé pour le h global à partir de la validation croisée: h_{CV1}

Estimateurs \hat{r} de r par Nadaraya-Watson avec la librairie `stat` - fonction : `ksmooth`

Utilisation de la fonction `ksmooth` et différentes fenêtre $h_{dpill}=0.2186849$, $h_{silver}=0.505695$, $h_{CV1}=0.3371859$, $h_{CV2}=0.1200601$

Nadaraya-Watson avec `ksmooth` et différents h

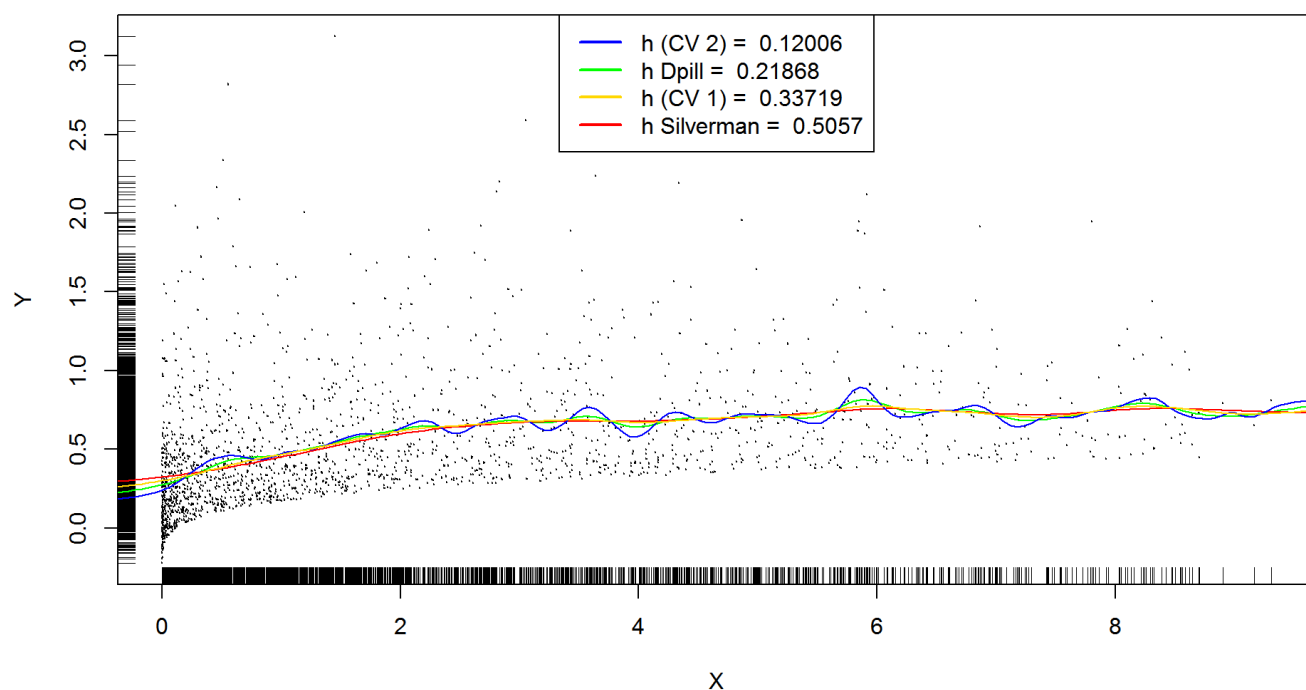


L'estimateur est sensible au choix de h . L'estimateur de Nadaraya-Watson est très oscillant par construction.

Estimateurs \hat{r} de r par Nadaraya-Watson à partir de la fonction recodée NW

Utilisation de la fonction NW et différentes fenêtre $h_{dpill}=0.2186849$, $h_{silver}=0.505695$, $h_{CV1}=0.3371859$, $h_{CV2}=0.1200601$

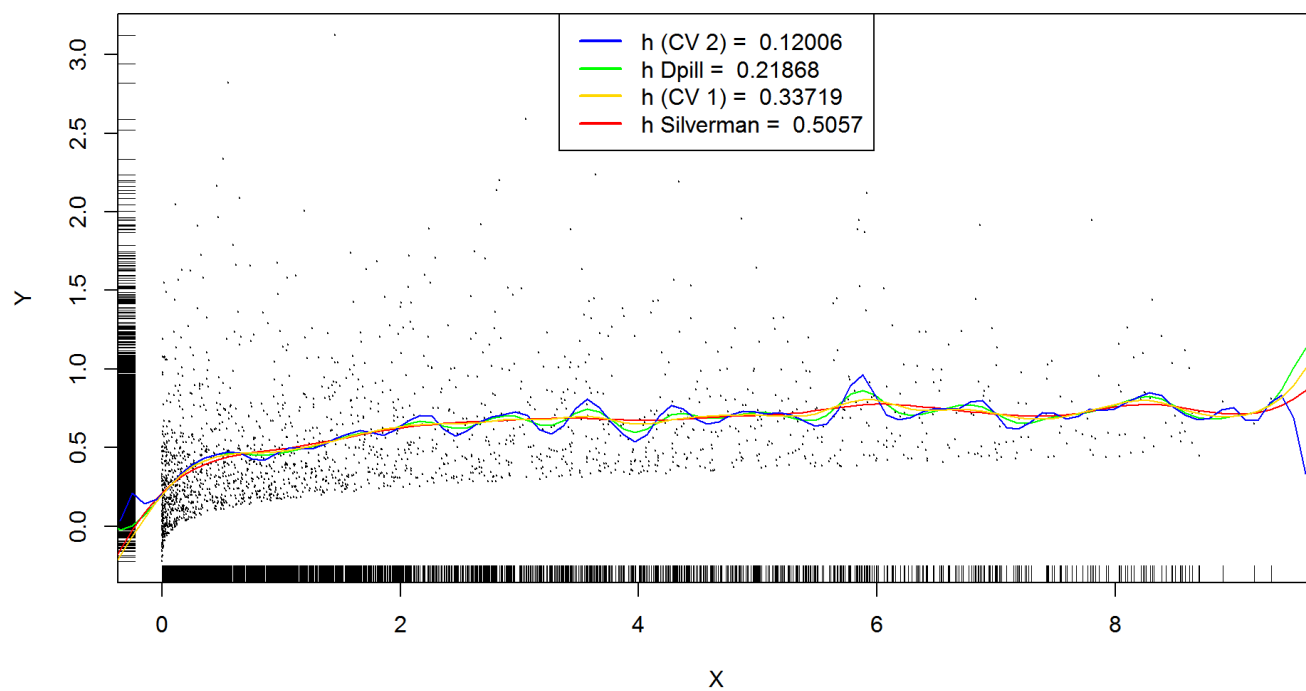
Nadaraya-Watson avec la fonction mNW et différents h



Estimateurs \hat{r} de r par polynômes locaux

Utilisation de la fonction locpoly du package Kersmooth avec différentes fenêtre $h_{dpill}=0.2186849$, $h_{silver}=0.505695$, $h_{CV1}=0.3371859$, $h_{CV2}=0.1200601$ On choisie le degès 2

Polynômes locaux de degrés 2 avec locpoly et différents h



2.3. Estimation de r en regressant Y_1 sur $\log(X)$

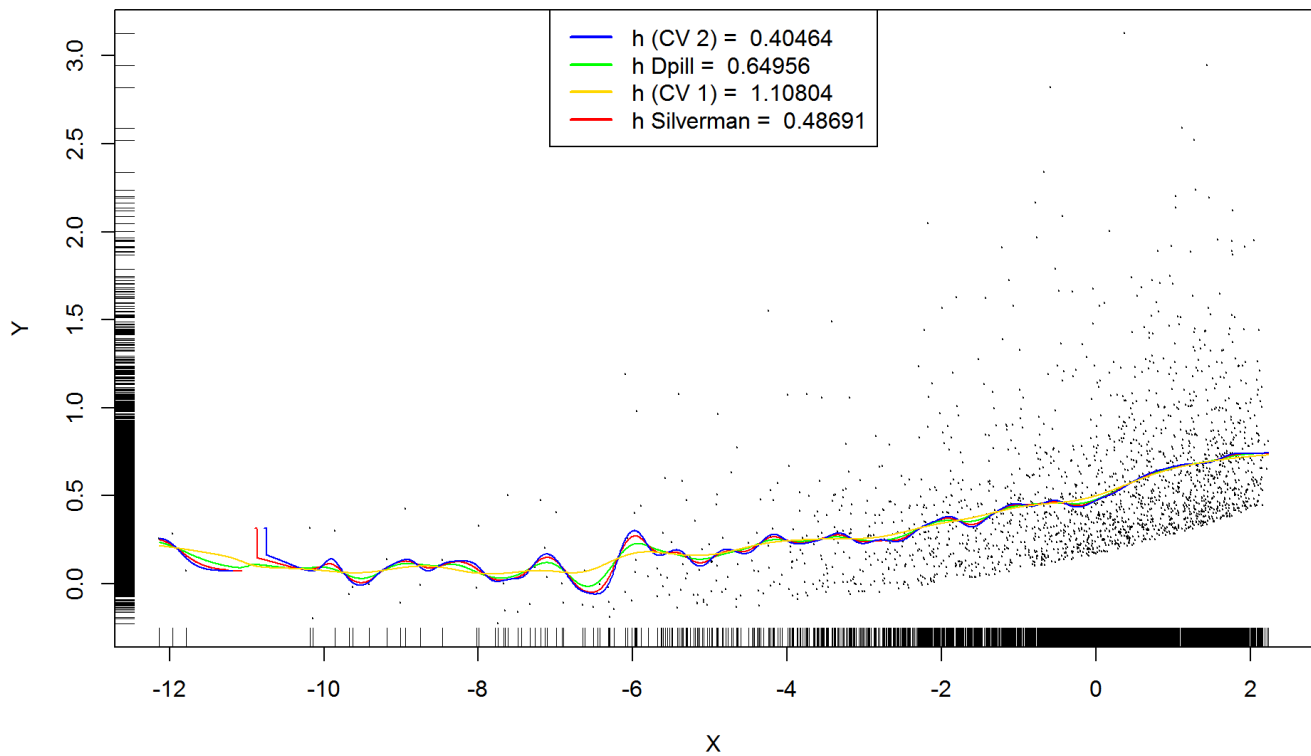
Choix du h optimal à partir de la fonction $dpill$, de la règle de Silverman et par validation croisée

```
## [1] "h_dpill : 0.649558017143598 h_silver : 0.48691251968111 h_CV1 ; 1.10804020100503 h_CV2 ; 0.404638091616267"
```

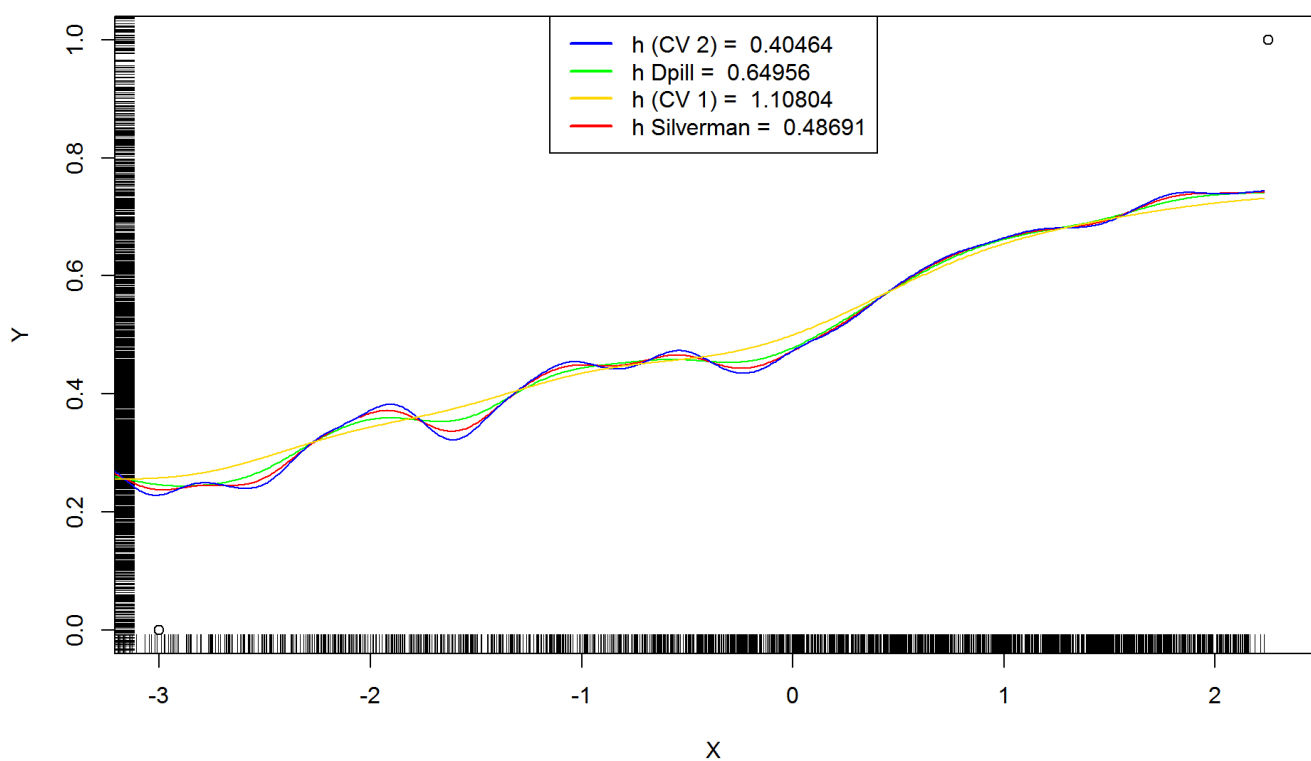
Estimateurs \tilde{r} de r par Nadaraya-Watson avec la librairie stat - fonction : `ksmooth`

Utilisation de la fonction `ksmooth` avec différentes fenêtres $h_{dpill}=0.649558$, $h_{silverman}=0.4869125$, $h_{CV1}=1.1080402$, $h_{CV2}=0.4046381$

Estimateurs construit avec Nadaraya-Watson: `ksmooth` et différents h



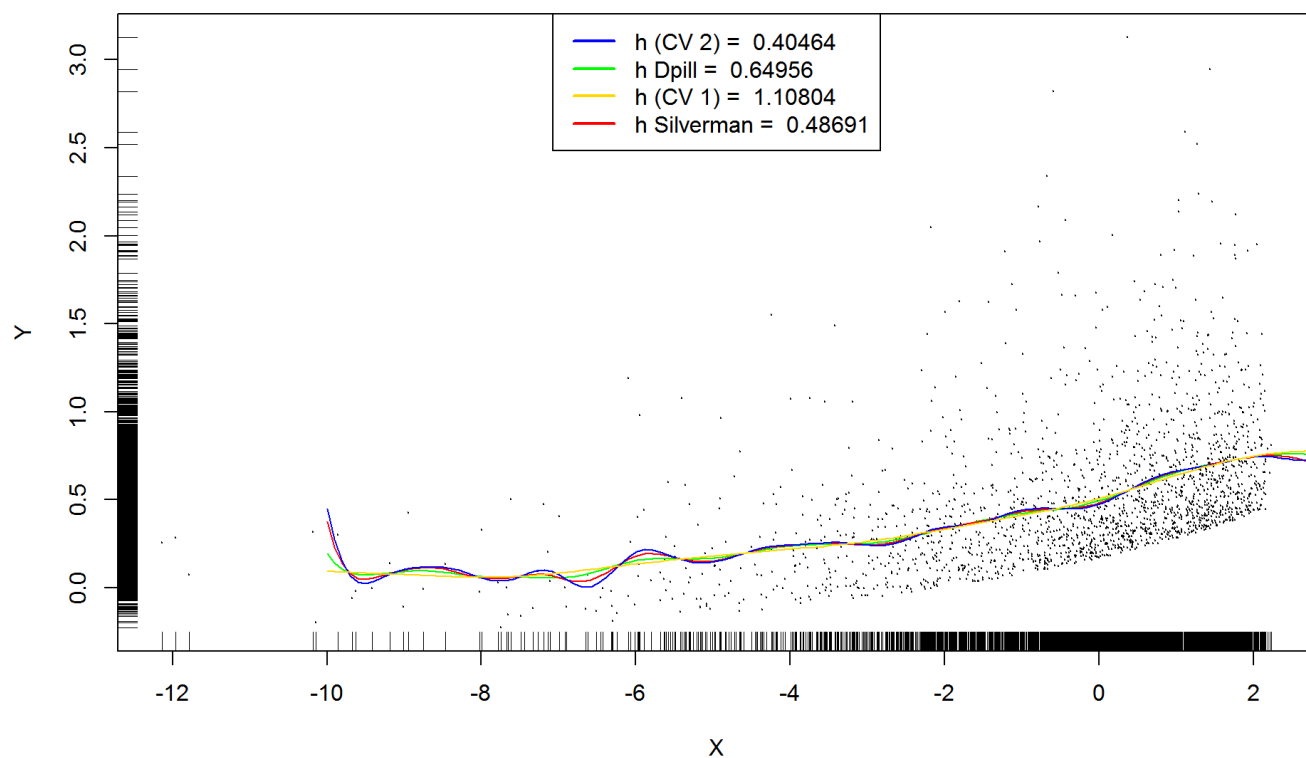
Zoom sur l'intervalle [-3,2]



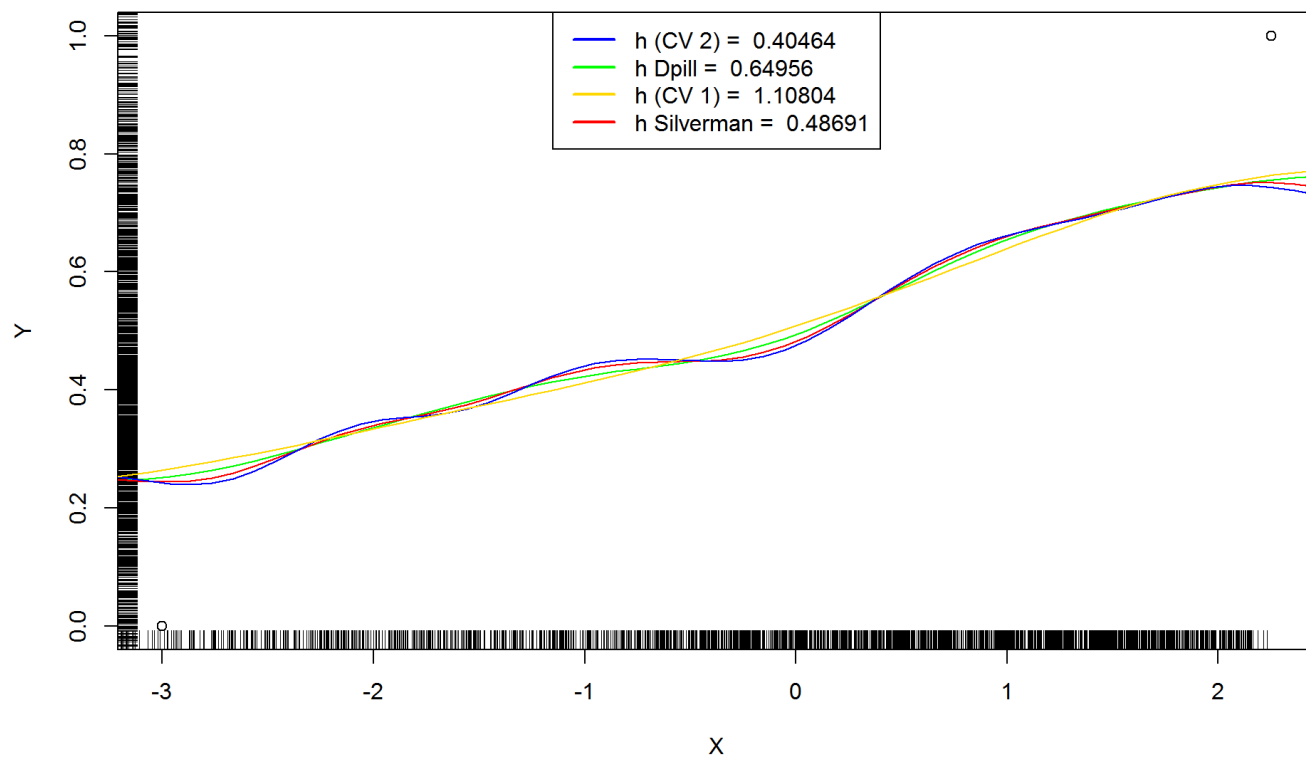
Estimateurs \tilde{r} de r par polynômes locaux de degrés 2

Utilisation de la fonction locpoly avec différentes fenêtres $h_{\text{dpill}}=0.649558$, $h_{\text{silverman}}=0.4869125$, $h_{\text{CV1}}=1.1080402$, $h_{\text{CV2}}=0.4046381$

Estimateurs construit par polynômes locaux de degrés 2: locpoly et différents h

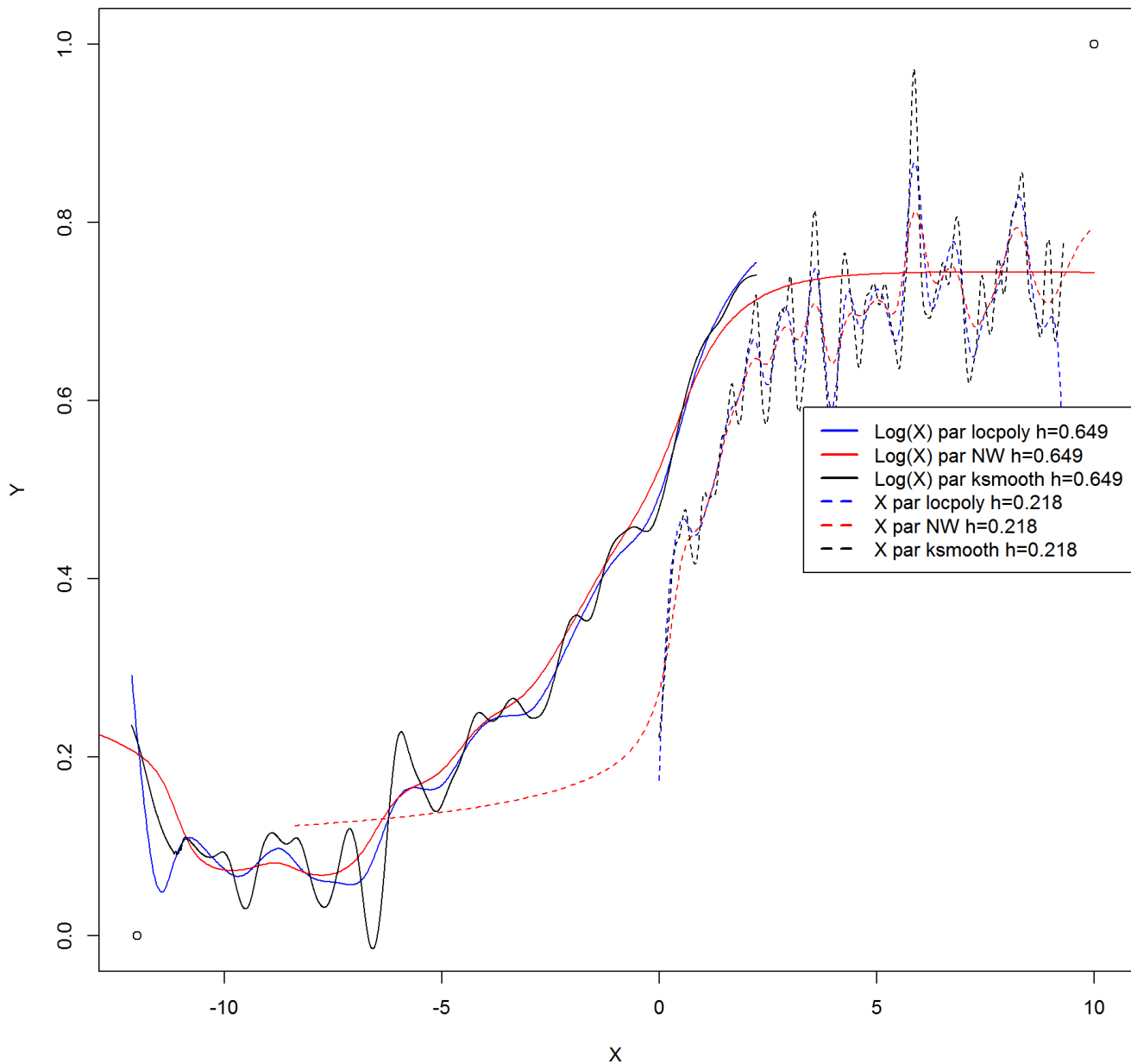


Zoom sur l'intervalle [-3,2]



Représentation sur un même graphe de \hat{r} et \tilde{r}

Estimateurs par Nadaraya–Watson et locPoly de degrés 2



2.4. Remarques - Explications

Dans les zones où la densité est élevée ($\log(X_i) \in [-4, 2]$ pour $\log(X)$ et $X_i \in]0+, 4]$ pour X) On remarque que les estimateurs basés sur la régression de Y_i sur $\log(X_i)$ sont bien plus réguliers, quasiment linéaires.

La transformation $\log(X)$ a permis de linéariser la zone à forte densité. C'est ce que l'on a remarqué au §2.1.

3. Etude de la densité μ des ξ_i

3.1 A partir du jeu de données Data1

3.1.1 Distribution approximative de $\tilde{\xi}_i$

```
##      X.1      X      Y1
## Min.   : 1.0   Min.   :0.000005 Min.   : -0.2244
## 1st Qu.: 250.8 1st Qu.:0.234186 1st Qu.: 0.2545
## Median : 500.5 Median :1.035451 Median : 0.4186
## Mean   : 500.5 Mean   :1.997154 Mean   : 0.5045
## 3rd Qu.: 750.2 3rd Qu.:3.332095 3rd Qu.: 0.6604
## Max.   :1000.0 Max.   :8.707688 Max.   : 2.9446
```

On a la représentation suivante $Y_i - r(X_i) = \sigma \xi_i$ (cas homoscédastique σ est constant)

Par définition $\tilde{\xi}_i = Y_i - \hat{r}(X_i)$ où $\hat{r}(x)$ est un estimateur de $r(x)$.

La distribution approximative de $\tilde{\xi}_i$ est celle de ξ_i à la constante multiplicative près σ .

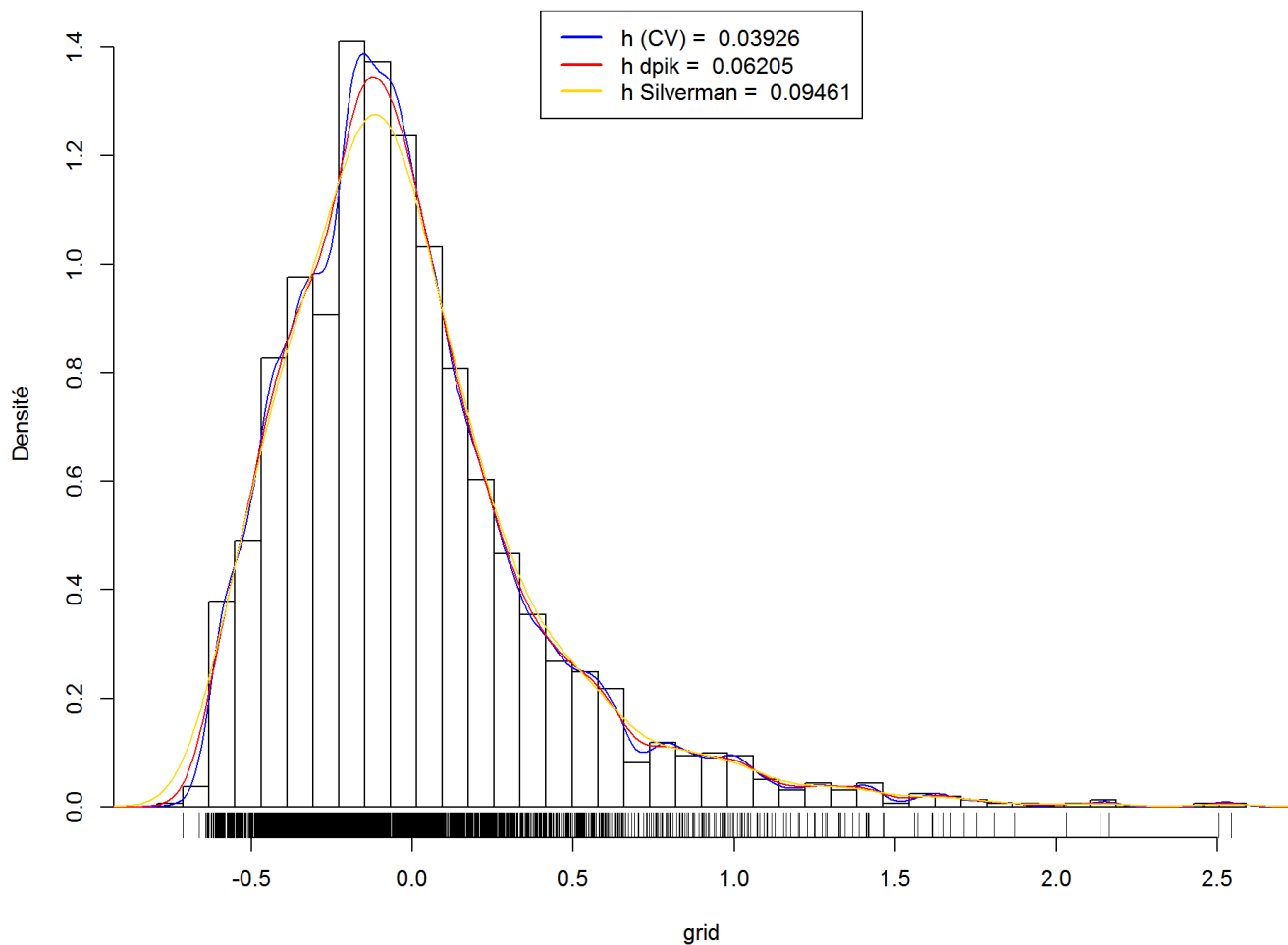
3.1.2 Représentation de la densité $\mu(x)$ des ξ_i

A partir du h établi à la question 2.2: $h_{dpik}=0.2186849$ et de l'estimateur \hat{r}_h on calcul un h optimal pour $Y_i - \hat{r}_h(X_i)$ On obtient:

```
## [1] "h_dpik : 0.0620479371982669 h_silver : 0.0946066036212771 h_density ; 0.0638864271238886 h_ucv ; 0.0392636826544965"
```

On estime alors la densité μ avec la fonction `bkde` de R.

Histogramme et Estimateurs de la densité μ de ξ pour différentes fenêtres: h



3.1.3. Interêt d'avoir decoupé le jeu de donnees selon J+ et J-

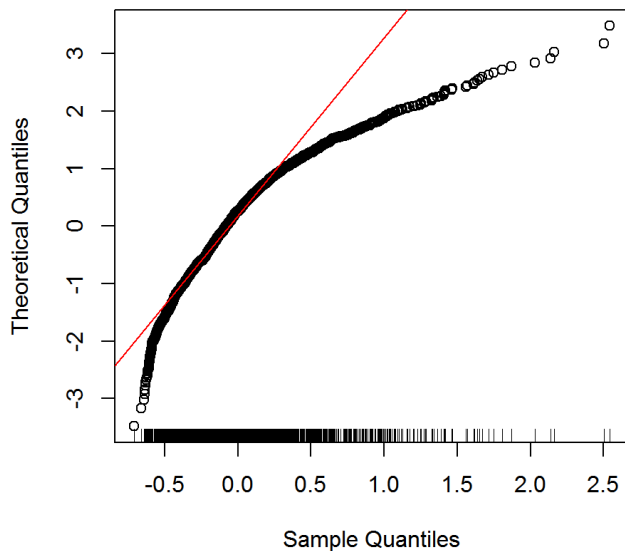
On a ainsi un jeux de données d'apprentissage et de test. On peut utiliser le jeux de données d'apprentissage pour estimer et construire nos estimateurs, le jeux de test pour calculer une erreur de prédiction. A partir de cette erreur de prédiction on a un critère pour choisir le meilleur estimateurs

3.1.4. La densité μ peut-elle être gaussienne

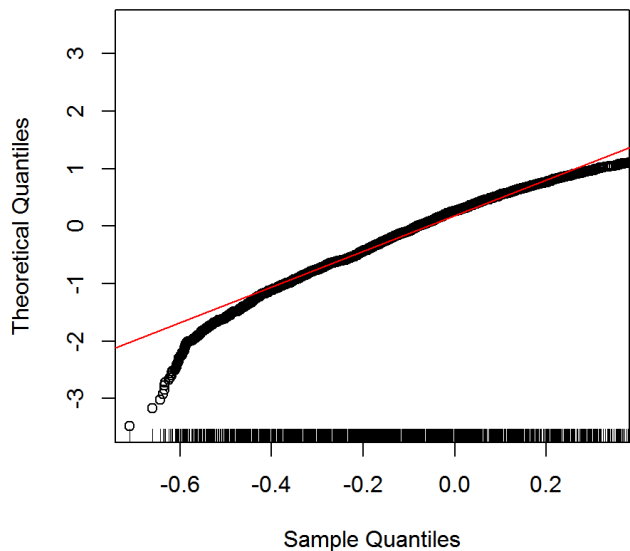
A la vue des graphiques de densité, on a trop de dissymétrie pour avoir une gaussienne. On va le préciser avec le protocole empirique de verification suivant:

- 1. test du QQPlot

Q-Q plot pour la loi μ



Q-Q plot pour la loi μ quantile 85% $q=0.337$



Le QQPlot, graphique d'adéquation des quantiles rejette l'hypothèse de normalité si l'on regarde la globalité de l'échantillon. C'est moins sûr si l'on regarde le sous ensemble qui correspond au quantile 85% qui vaut 0.337 (2ème graphique).

- 2. test de shapiro

```
##  
## Shapiro-Wilk normality test  
##  
## data: estimMu  
## W = 0.89345, p-value < 2.2e-16
```

Le test de Shapiro-Wilk donne une p-value < 2.2e-16. L'hypothèse de normalité est rejetée.

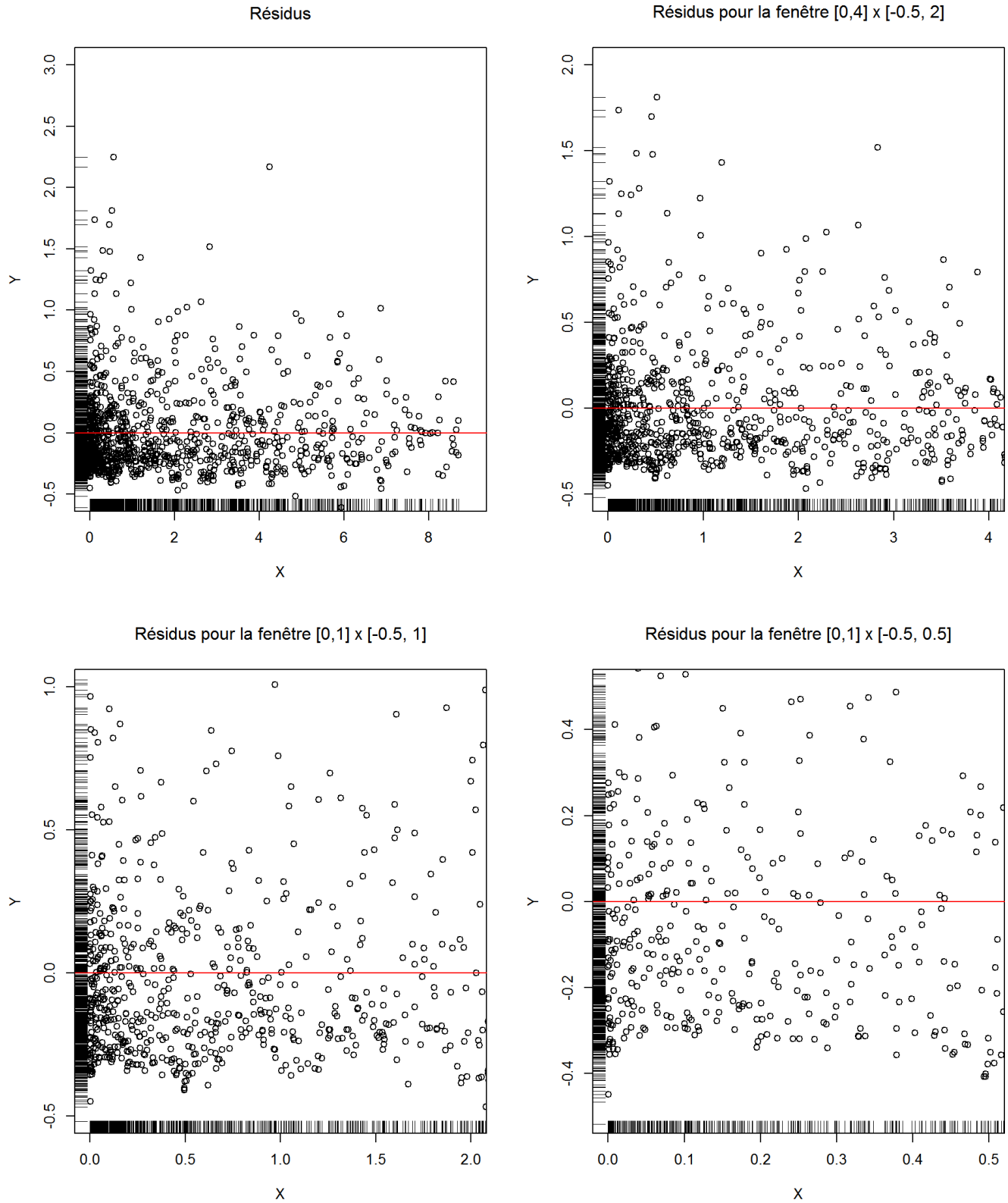
- 3. test de Kolmogorov-Smirnoff

```
##  
## One-sample Kolmogorov-Smirnov test  
##  
## data: estimMu  
## D = 0.10503, p-value < 2.2e-16  
## alternative hypothesis: two-sided
```

la p-value n'est pas significative l'hypothèse de normalité est rejetée. La densité μ n'est donc pas gaussienne.

3.1.5. homoscedasticité du modèle

Pour tester que le modele est bien homoscedastique, on peut tracer un graphe des résidus.



On ne remarque pas de structures particulières ou de tendances. La répartition est assez uniforme, en particuliers dans la zone de forte densité (proche de $x=0$). Ce qui nous amène à penser que l'hypothèse d'homoscedasticité est bien vérifiée.

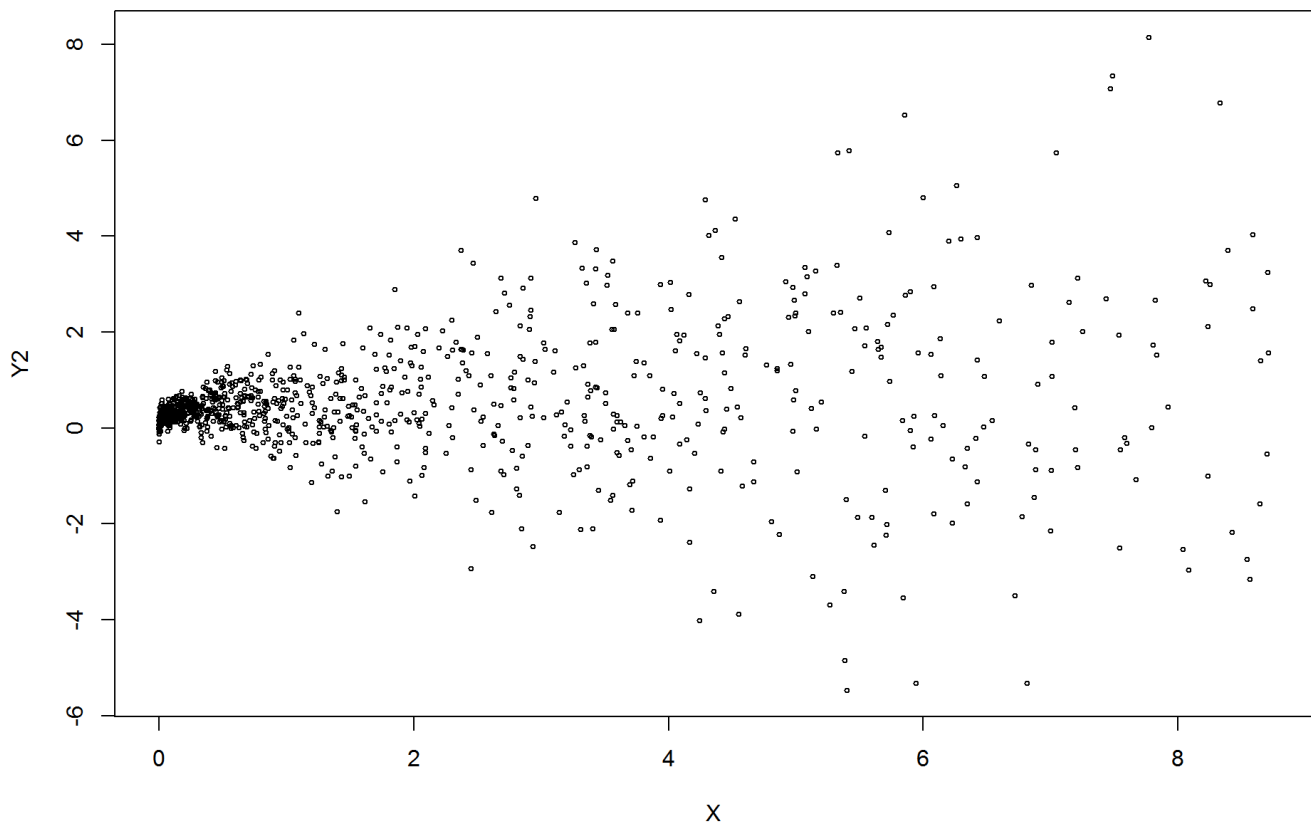
3.2 A partir du jeu de données Data2

On cherche à estimer μ et σ^2 . Pour cela, on coupe à nouveau l'échantillon en deux et on considère à nouveau $\tilde{\xi}_i$

```
summary(d2)
```

```
##      X.1      X      Y2
## Min.   : 1.0   Min.   :0.000005 Min.   : -5.46738
## 1st Qu.: 500.8 1st Qu.:0.258074 1st Qu.: 0.08333
## Median :1000.5 Median :1.192414 Median : 0.35947
## Mean   :1000.5 Mean   :2.029447 Mean   : 0.53951
## 3rd Qu.:1500.2 3rd Qu.:3.318174 3rd Qu.: 0.87849
## Max.   :2000.0 Max.   :9.308684 Max.   :10.15297
```

Jeux de données Data2 observations X en abscisse et Y2 en ordonnée.



3.2.1. Justifier qu'en régressant ξ_i sur X_i on obtient un estimateur de σ^2

Par définition $\tilde{\xi}_i = Y_i - \hat{r}(X_i)$ où $\hat{r}(x)$ est un estimateur de $r(x)$.

Ainsi $\tilde{\xi}_i^2 = (Y_i - \hat{r}(X_i))^2$

En remplaçant par l'expression de $Y_i = r(X_i) + \sigma(X_i)\xi_i$ on obtient $\tilde{\xi}_i^2 = (r(X_i) + \sigma(X_i)\xi_i - \hat{r}(X_i))^2$

Puis en développant $\tilde{\xi}_i^2 = (r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 + \sigma(X_i)^2\xi_i^2 + 2(r(X_i) - \hat{r}(X_i))\sigma(X_i)\xi_i$

On conditionne par rapport à X_i et on utilise l'hypothèse d'indépendance de ξ_i

$$E(\tilde{\xi}_i^2 | X_i) = E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 | X_i) + E(\sigma(X_i)^2 | X_i)E(\xi_i^2) + 2E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))\sigma(X_i)\xi_i | X_i)E(\xi_i)$$

Par hypothèse $E(\xi_i) = 0$ et $E(\xi_i^2) = 1$ on a donc finalement: $E(\tilde{\xi}_i^2 | X_i) = E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 | X_i) + E(\sigma(X_i)^2 | X_i)$

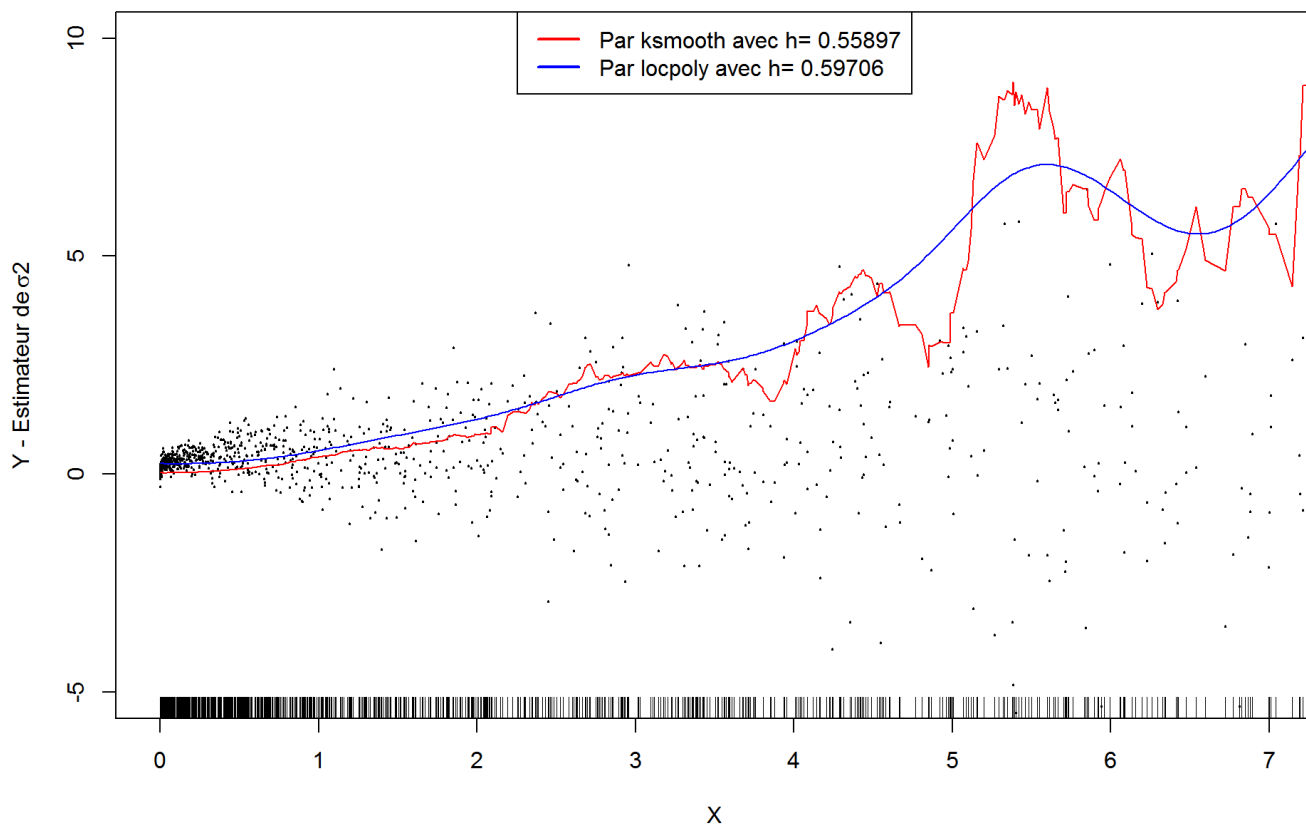
Ce qui donne $E(\tilde{\xi}_i^2 | X_i) = (r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 + \sigma(X_i)^2$

Comme $\hat{r}(X_i)$ est un estimateur de $r(X_i)$ on a bien le résultat.

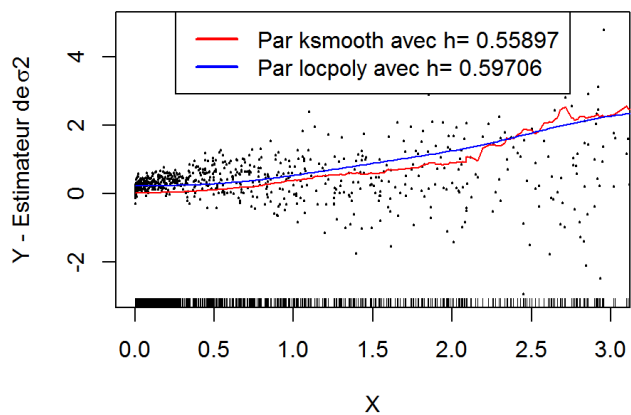
Implémentation et visualisation

A partir de l'estimateur $\hat{r}(X_i)$ on va construire un estimateur de $\sigma(X_i)^2$. Pour cela on construit un estimateur en regressant sur X_i le carré des résidus: $(Y_i - \hat{r}(X_i))^2$. On utilise la fonction `ksmooth` et `locpoly` (degrès 2).

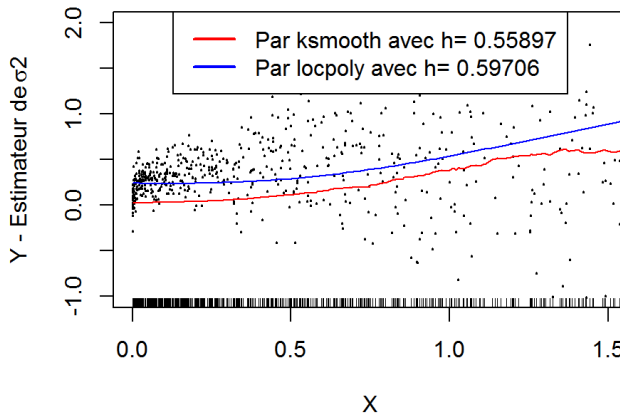
Données de Data2 et estimation de la variance σ^2



Données Data2 et estimation de σ^2 sur $[0,3]$



Données Data2 et estimation de σ^2 sur $[0,1.5]$



En comparant au jeu de données (nuage de points Data2) on retrouve bien le résultat attendu. Peu de variance où la densité est élevée dans l'intervalle $[0+,1]$. Les points sont proches les uns des autres. Ensuite la variance augmente en même temps que la densité des points diminue. Avec un premier saut à partir de $x=2$ puis $x=4$. Ensuite la densité des observations est faible.

3.2.2. La densité μ peut-elle être gaussienne

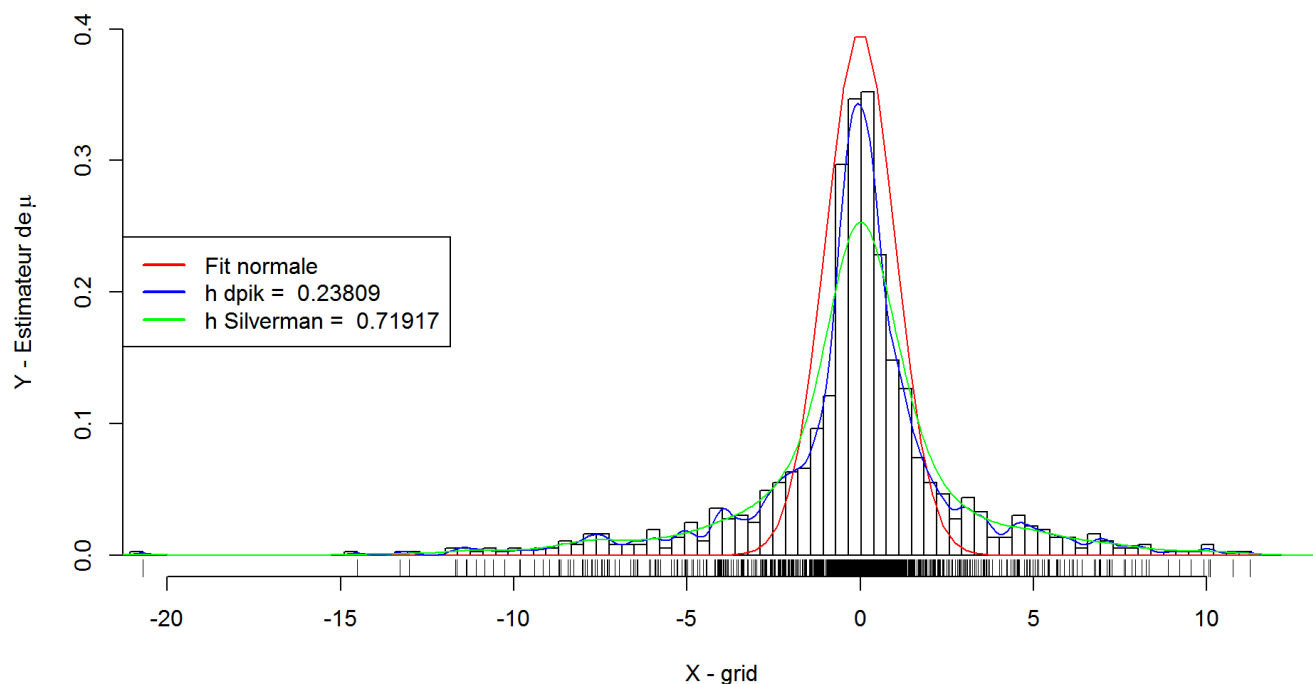
Avant d'appliquer les tests classiques (QQPlot, Test de Shapiro et KS) on va regarder comment se comportent les estimateurs à noyaux gaussiens. On estime la densité μ des ξ_i à partir de l'estimation $(Y_i - \hat{r}(X_i))/\hat{\sigma}^2(X_i)$ où $\hat{\sigma}^2(X_i)$ est l'estimateur de $\sigma^2(X_i)$ obtenu précédemment.

- On recherche tout d'abord le h optimal avec les méthodes habituelles: fonction dpik, règle de Silverman, fonction density, validation croisée.

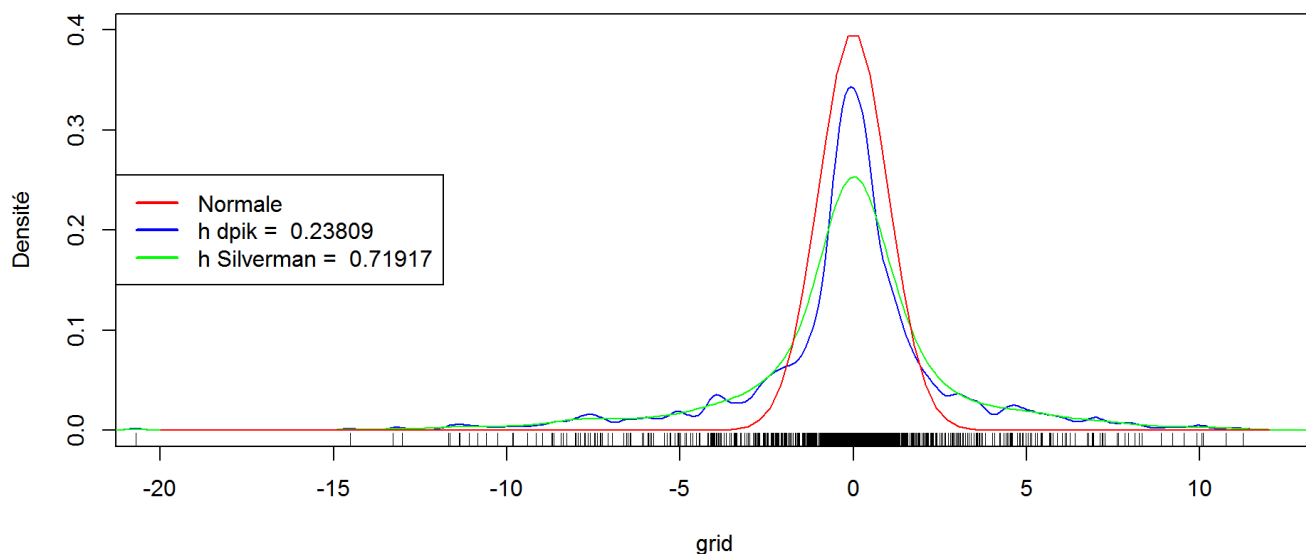
```
## [1] "h_dpik : 0.238094752525185 h_silver : 0.719173399214354 h_density ; 0.313922107129252 h_ucv ; 0.219334683237272"
```

- On estime la densité à partir de la fonction bkde que l'on représente graphiquement:

Histogramme et Estimateurs de la densité μ de ξ pour différentes fenêtres: h - cas hétéroscédastique

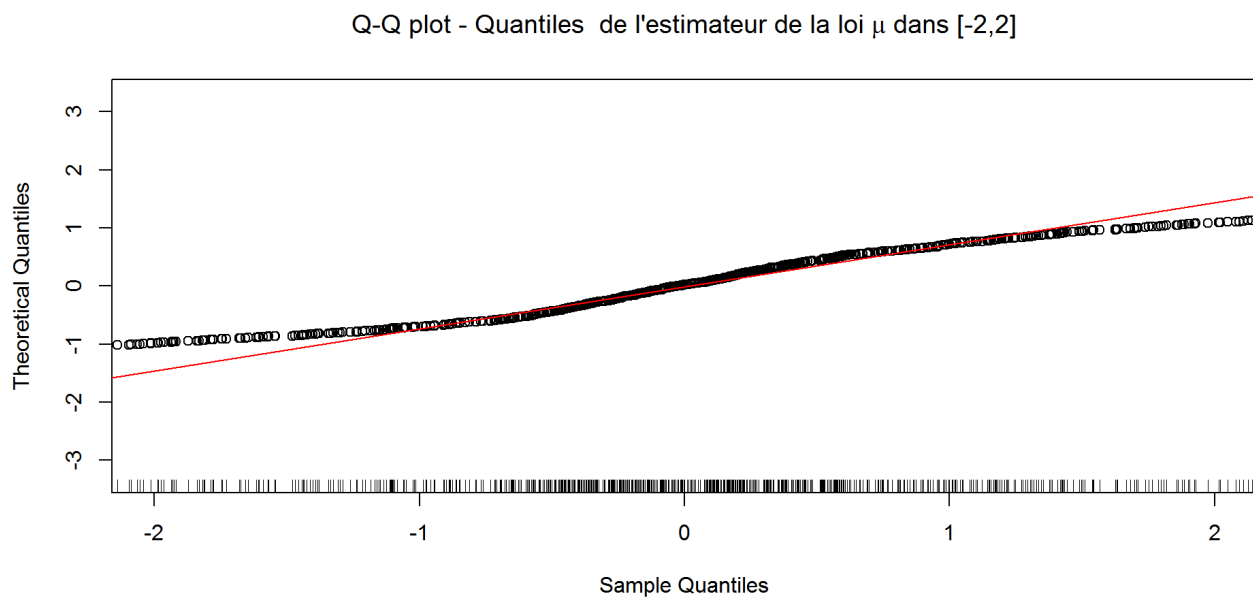
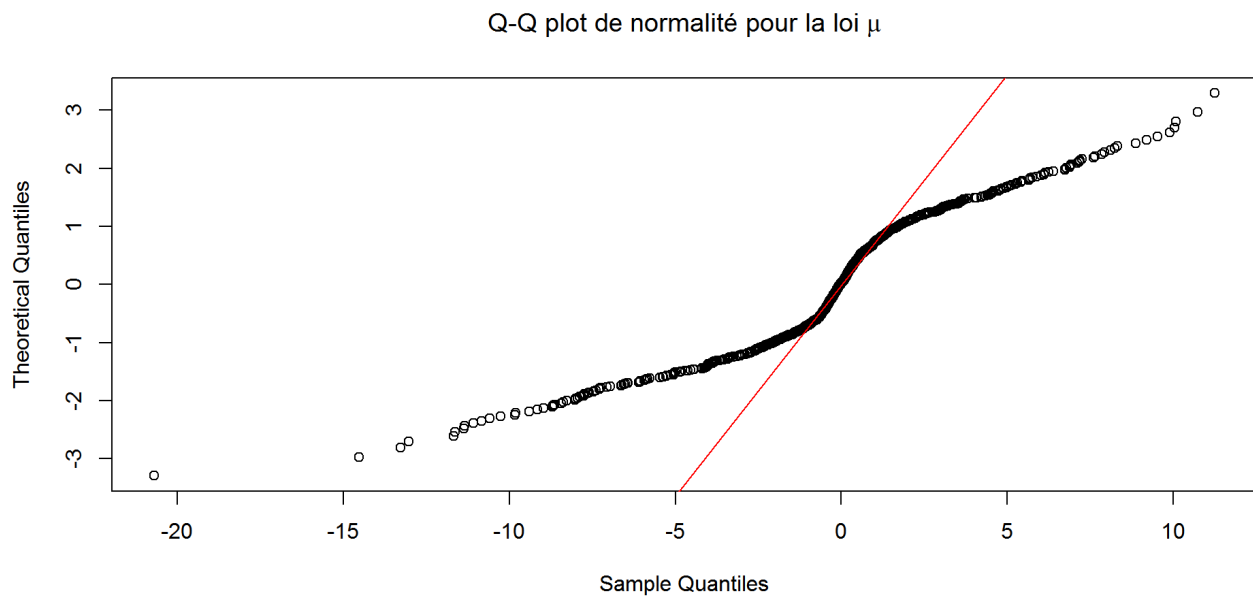


Estimateurs de la densité μ de ξ pour différentes fenêtres: h - cas hétéroscédastique



À la vue des graphiques les estimateurs de la densité μ semblent se rapprocher d'une gaussienne. On a gagné en symétrie et sur la forme générale par rapport au cas précédent étudié au §3.1.4. Maintenant on va vérifier l'hypothèse de normalité des données $(Y_i - \hat{r}(X_i))/\hat{\sigma}^2(X_i)$ avec un QQPlot et des tests.

- 1- test du QQPlot



L'hypothèse de normalité semble rejetée sur la globalité. Mais si on regarde le sous intervalle $[-2,2]$ des quantiles de l'estimation de la loi μ on a une bonne adéquation à la loi normale. De plus sur cette intervalle on a environ 75% des individus (lois quasi symétrique et 2 quantile à 86.5%). Par contre sorti de cette intervalle on diverge rapidement.

- 2- test de Shapiro

```
##
## Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  estMu_ks
## W = 0.88679, p-value < 2.2e-16
```

Le test de Shapiro-Wilk donne une p-value significative $< 2.2e-16$. L'hypothèse de normalité est rejetée.

- 3- test de Kolmogorov-Smirnoff

```
##
## One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
## data:  estMu_ks
## D = 0.15787, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: two-sided
```

La p-value est significative l'hypothèse de normalité est rejetée. D'après ces derniers tests la densité μ ne peut être gaussienne.