Régression non-paramétrique

Philippe Real

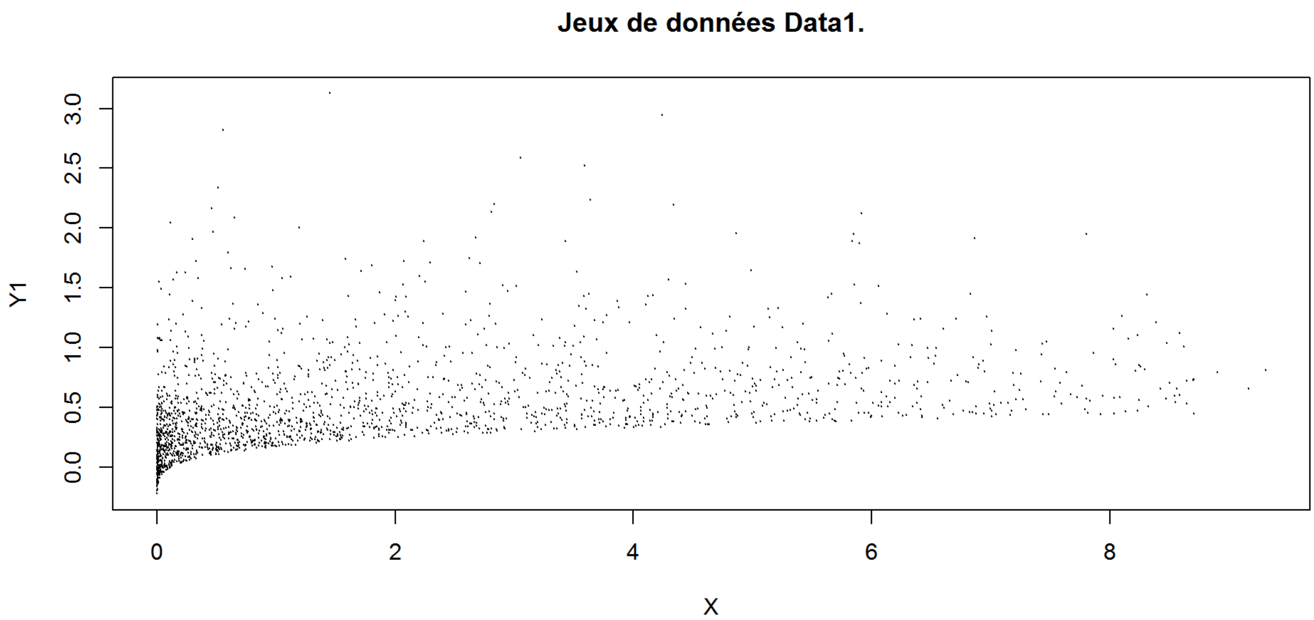
16/09/2019

1. Etude de la densitée g des X

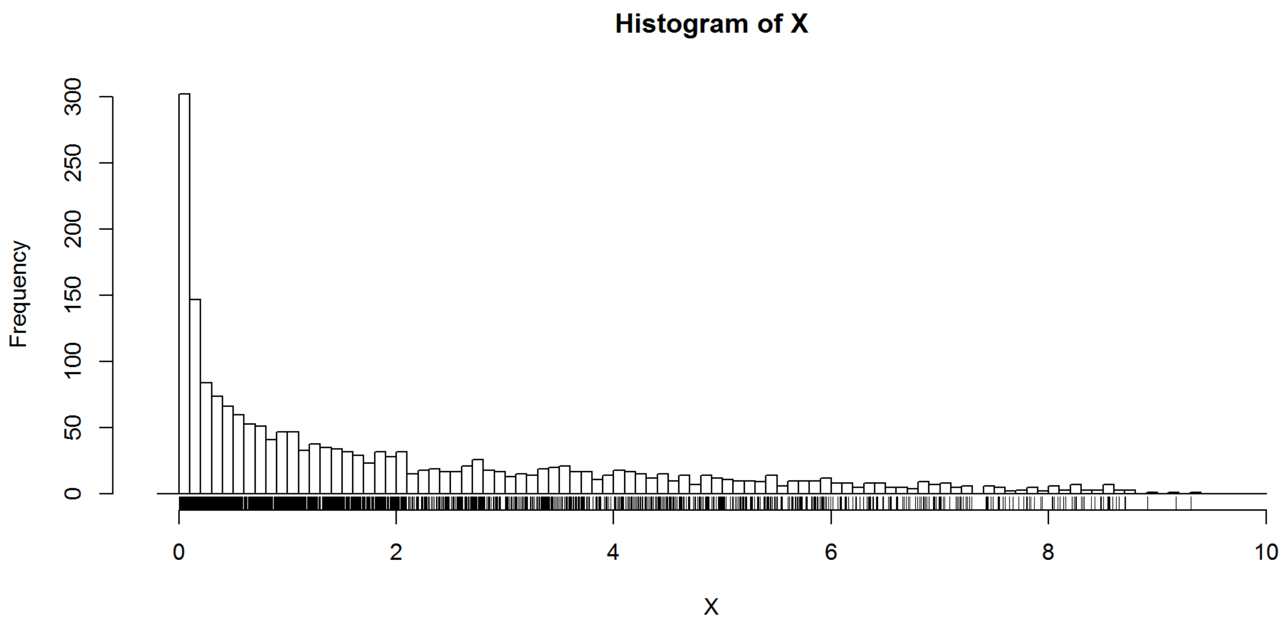
On utilise les données Data1. Jeux de données (X_i, Y_i) i=1,..,2000
Avec la représentation suivante : $Y_i = r(X_i) + \sigma\xi_i(X_i)$ (cas homoscédastique σ ne dépend pas de X)

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
```



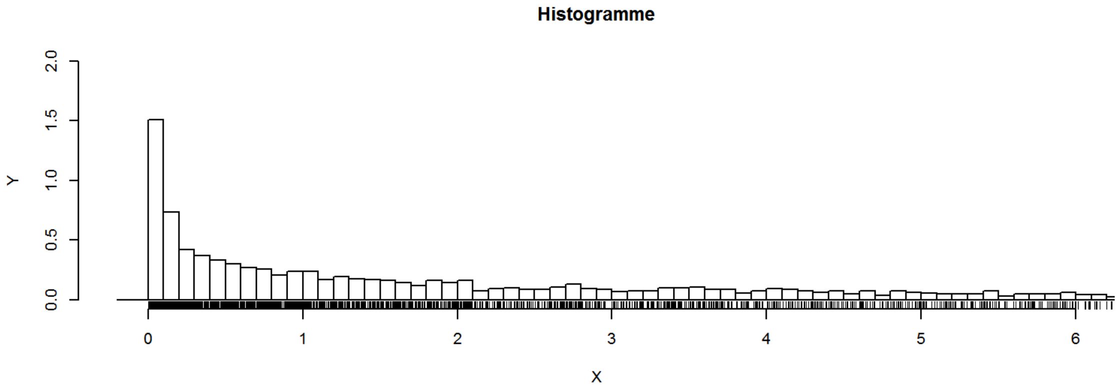
Pour avoir une idée de la densité de X on peut tracer son histogramme.

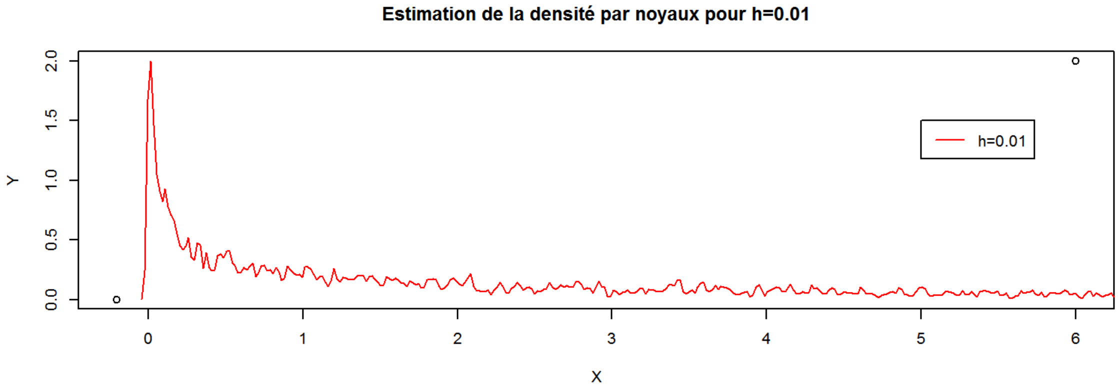


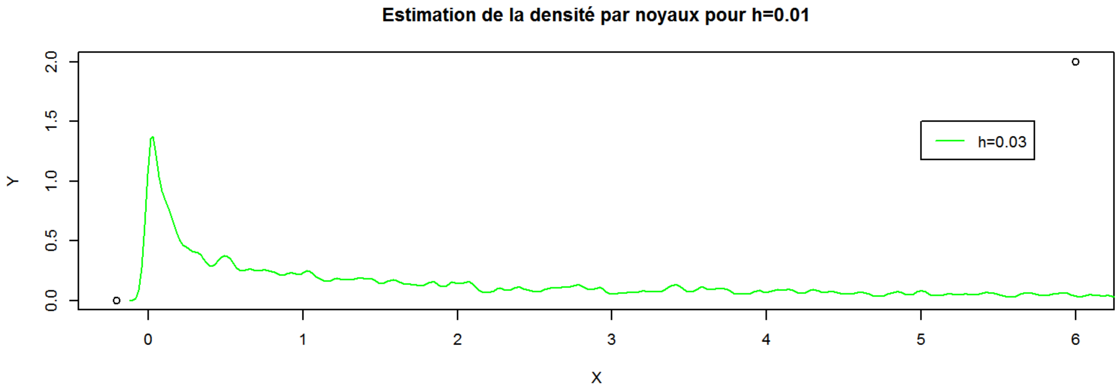
1.1 Estimateur non-paramétrique de g(x)

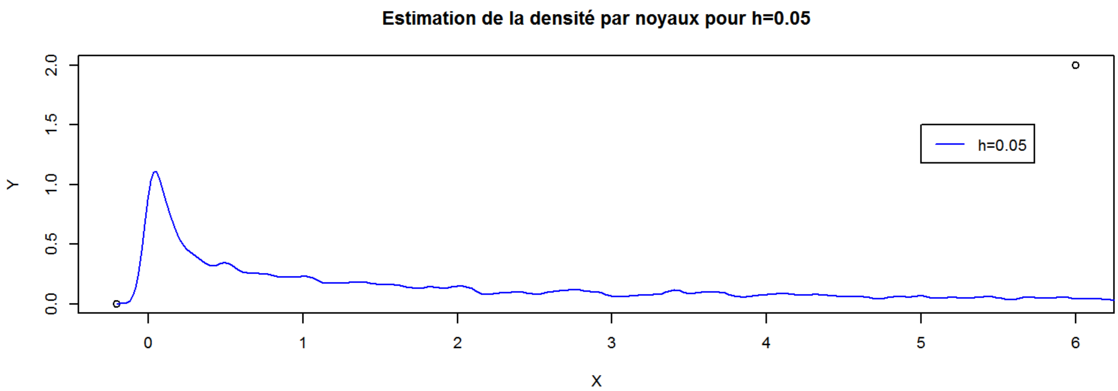
On peut utiliser la fonction bkde du package KernSmooth qui estime la densité par la méthode des noyaux. On prend comme noyau le noyau normal. Ce choix peut sembler arbitraire, mais on a vu que ce n'est pas le choix du noyau qui est le plus important dans l'estimation de la densité. On calcul cette estimateur de la densité pour différentes largeur 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



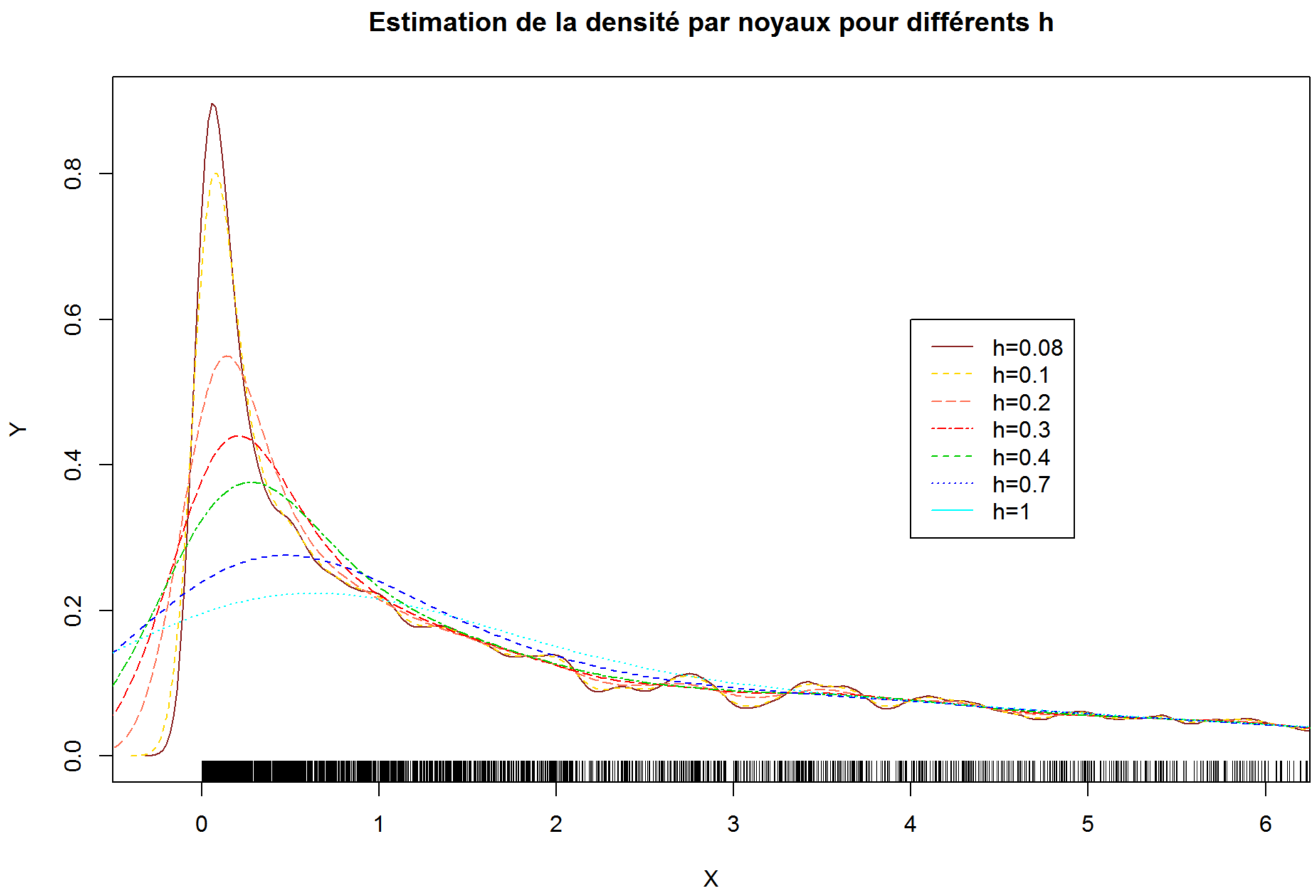






On remarque de fortes oscilations pour des h entre 0.01 et 0.05.

Estimateurs pour h variant de 0.08 à 1



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 intermédiare, un compromis qui minimise la variance sans entrainer 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 hn est la fenêtre donnée par validation croisée ou par une autre methode que l'on precisera.

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

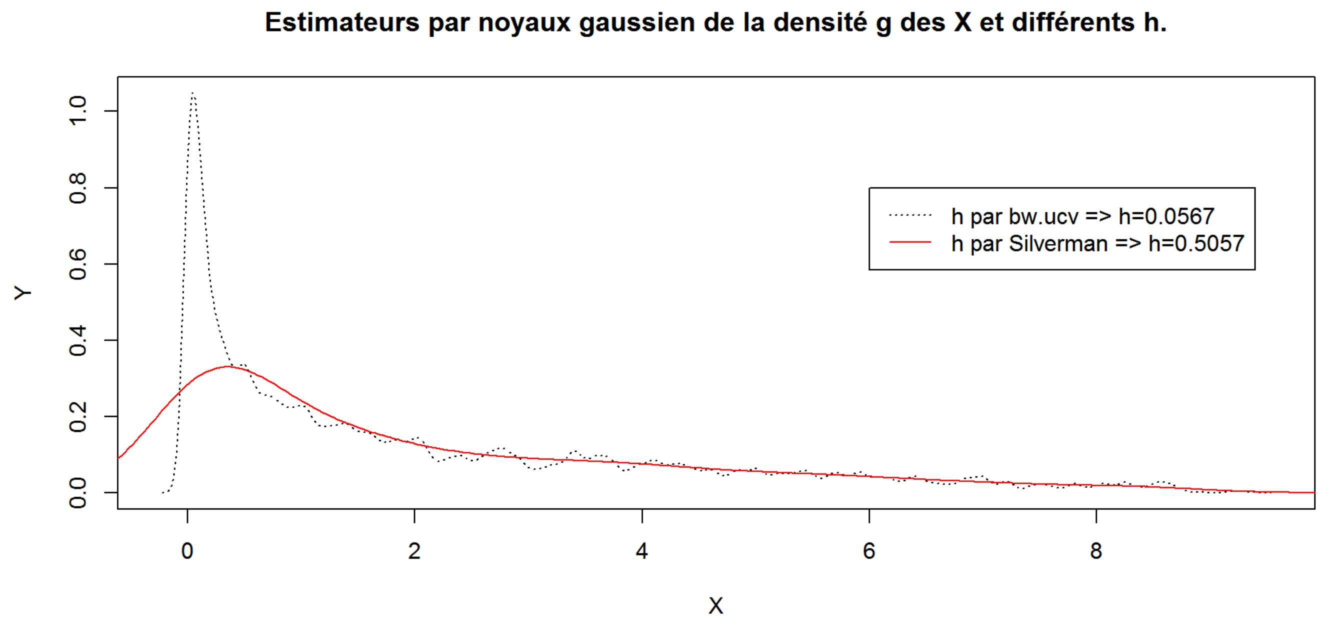
En appliquant la règle de Silverman, on obtient le h suivant:

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

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

Fonction bw.nrd

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



1.2.3 Méthodes alternatives

Fonction density

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

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

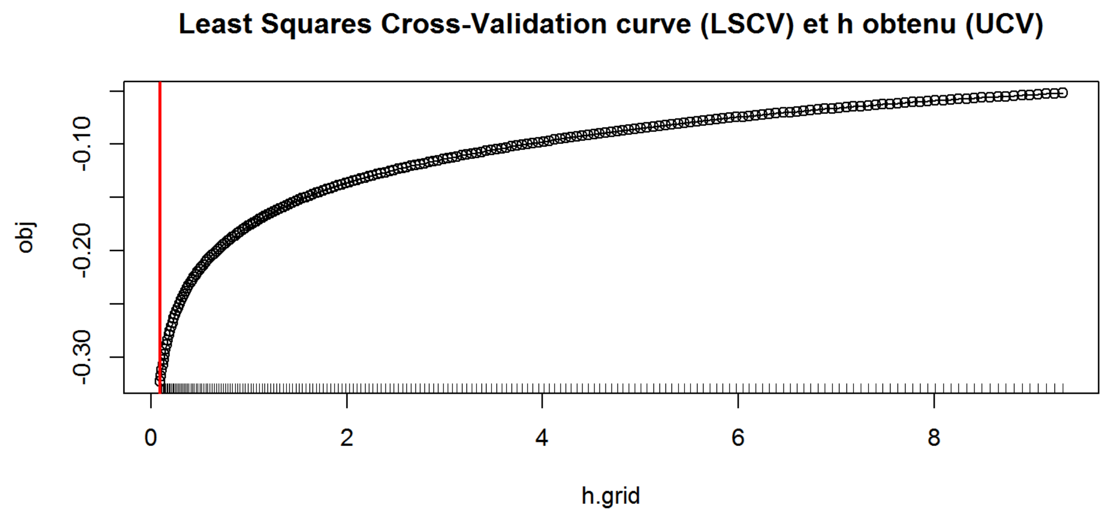
Fonction dpik

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

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

Fonction ucv recodée

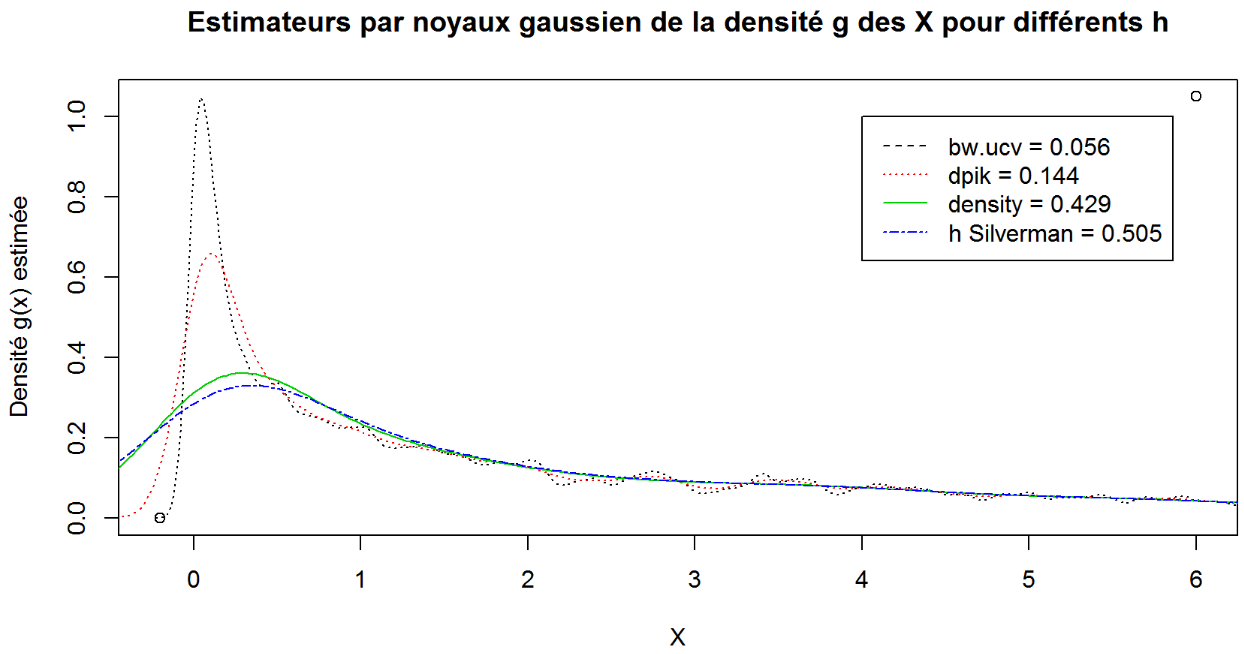
La fenêtre h est obtenu par (UCV) de Least Squares Cross-Validation curve (LSCV) et h obtenu (UCV)




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

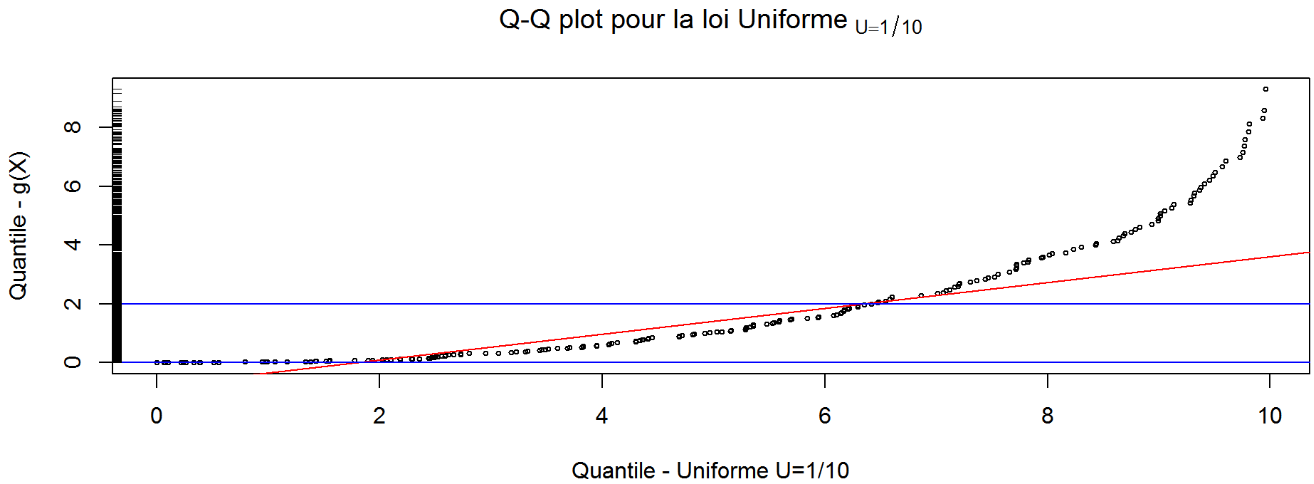
Résumé des résultats

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



1.3 QQPlot - g(x) densité Uniforme

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



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 si déraisonnable. En particulier pour les $X_i \in [0+, 2]$ qui représente une forte concentration des données environ 63%. Mias celà ne semble pas suffisant pour valider l'hypothèse.

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

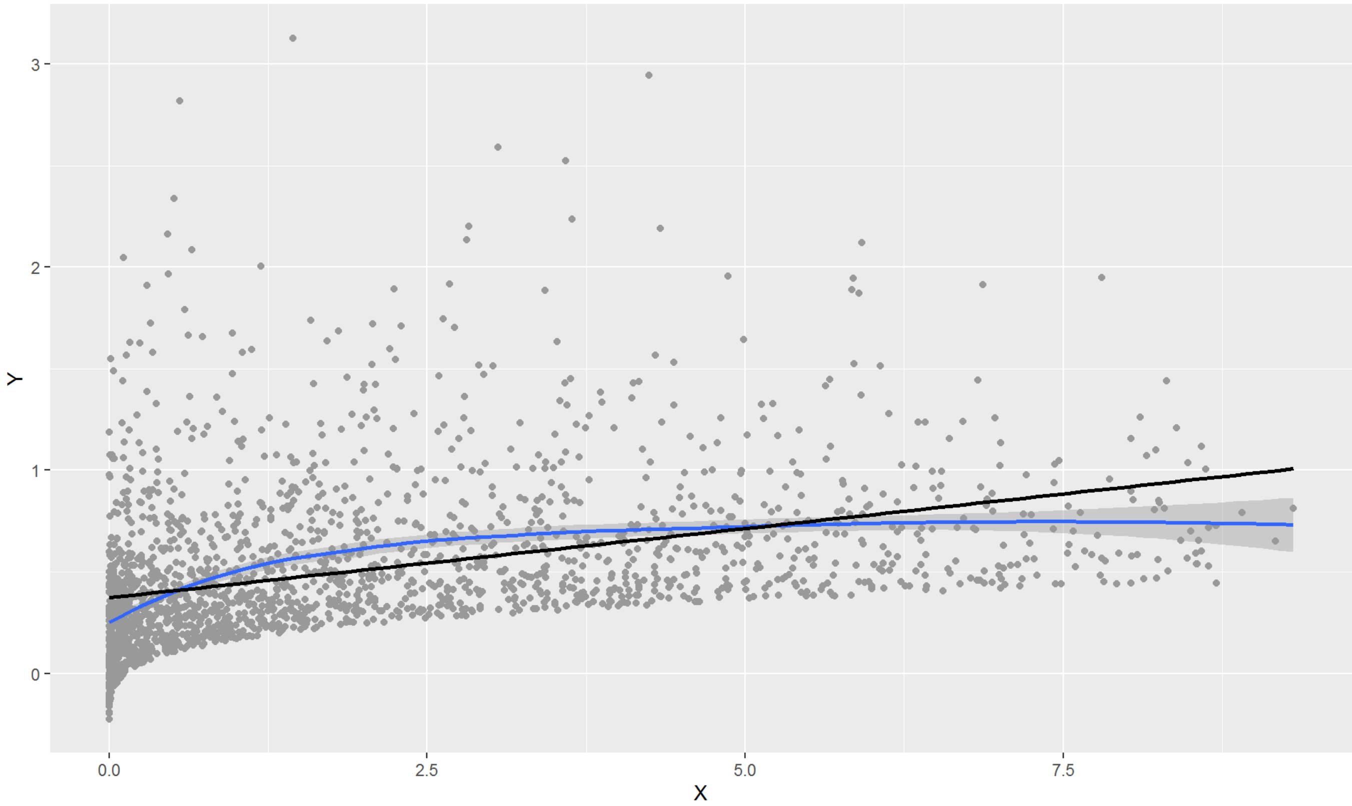
On aura plus de précision où la densité des données est importante. Le quantile à 90% se situe au point x=5.461349. On a une répartition de 90% des données sur la 1ère moitié de l'intervalle: [0+dela , 5.46]. La variance ne dépend pas de X et semble assez constante. Donc plus de précision dans l'intervalle [0+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)

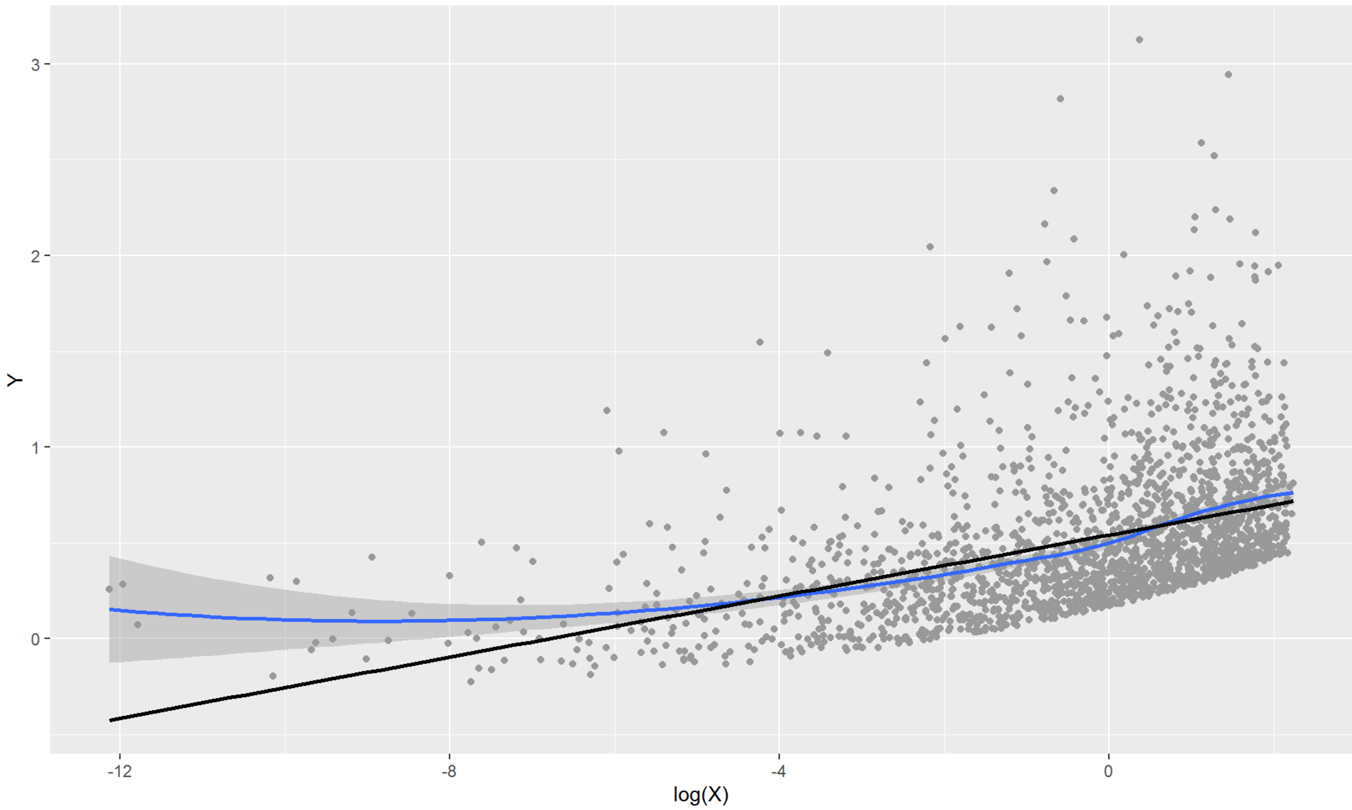
On est dans le cadre de l'estimation non paramétrique, on reprend les hypothèses classiques On utilise les données de Data1, (X,Y)

2.1 Linéarité de la fonction r

On trace Y1 en fonction de X. Sans transformation, à la vue du graphe, r ne peut être linéaire.



Maintenant On trace Y1 en fonction de log(X)



Dans la région [-5,1] où l'on retoùve 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 métodes: 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"
```

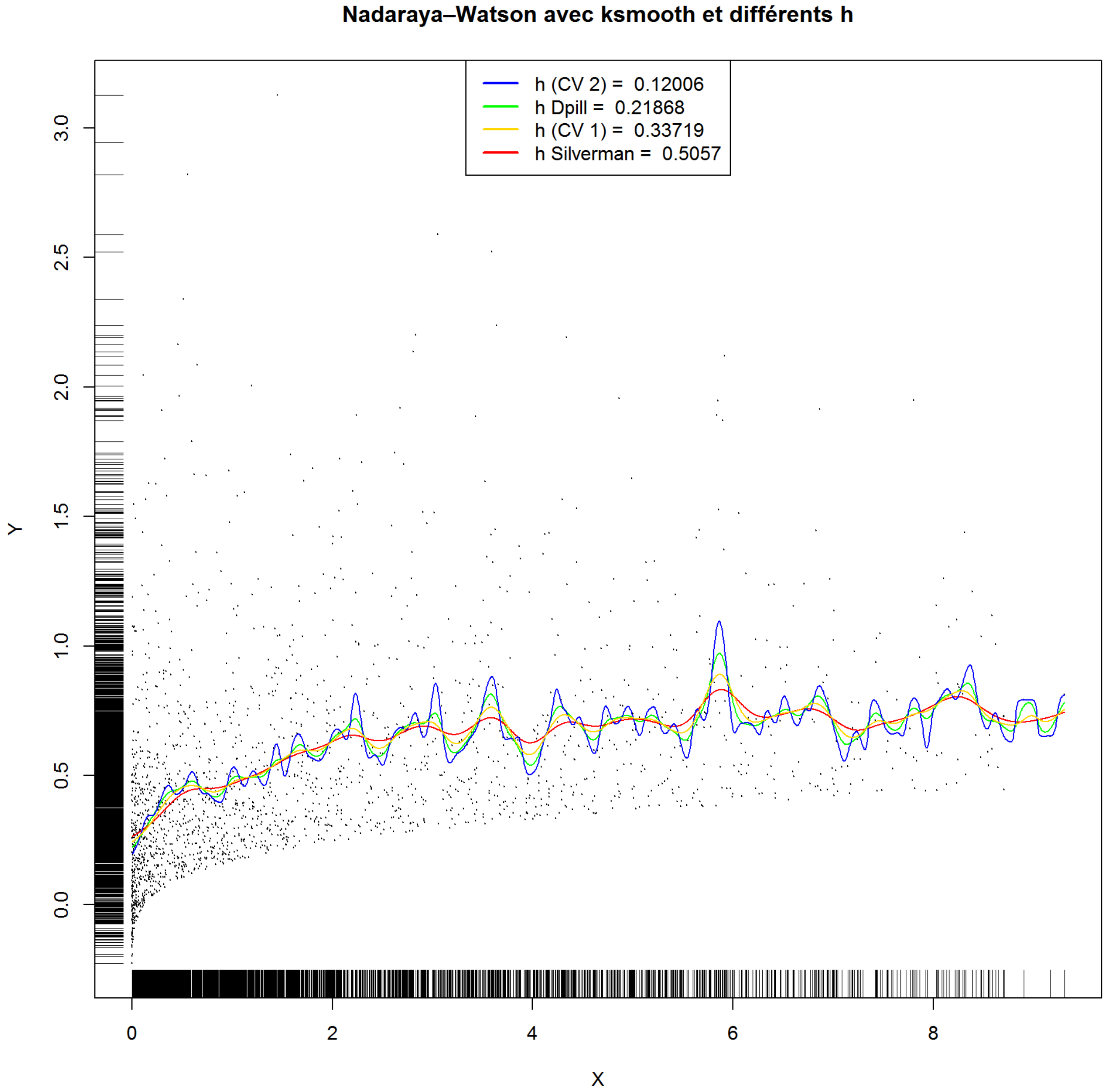
Test: choix de h local

```
##     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

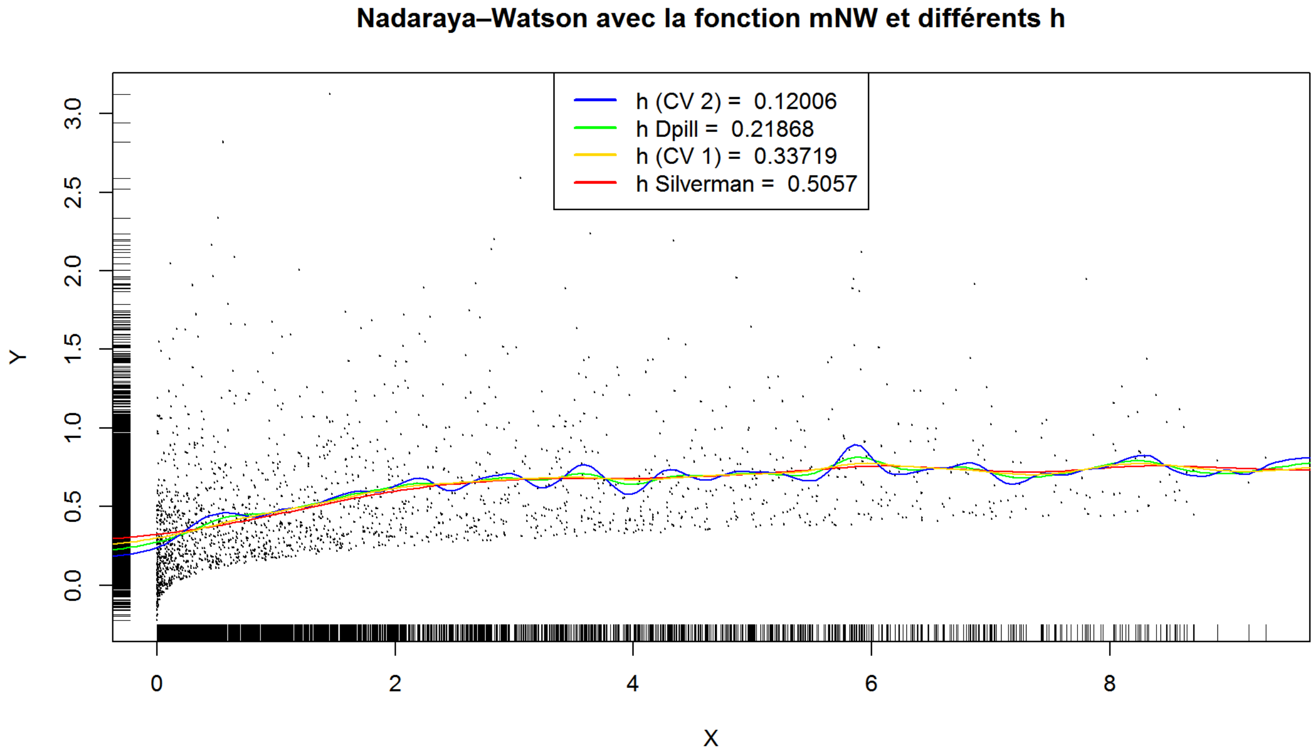
Utilisation de la fonction ksmooth et différentes fenêtre h_dpill=0.2186849, h_silver=0.505695, h_CV1=0.3371859, h_CV2=0.1200601



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

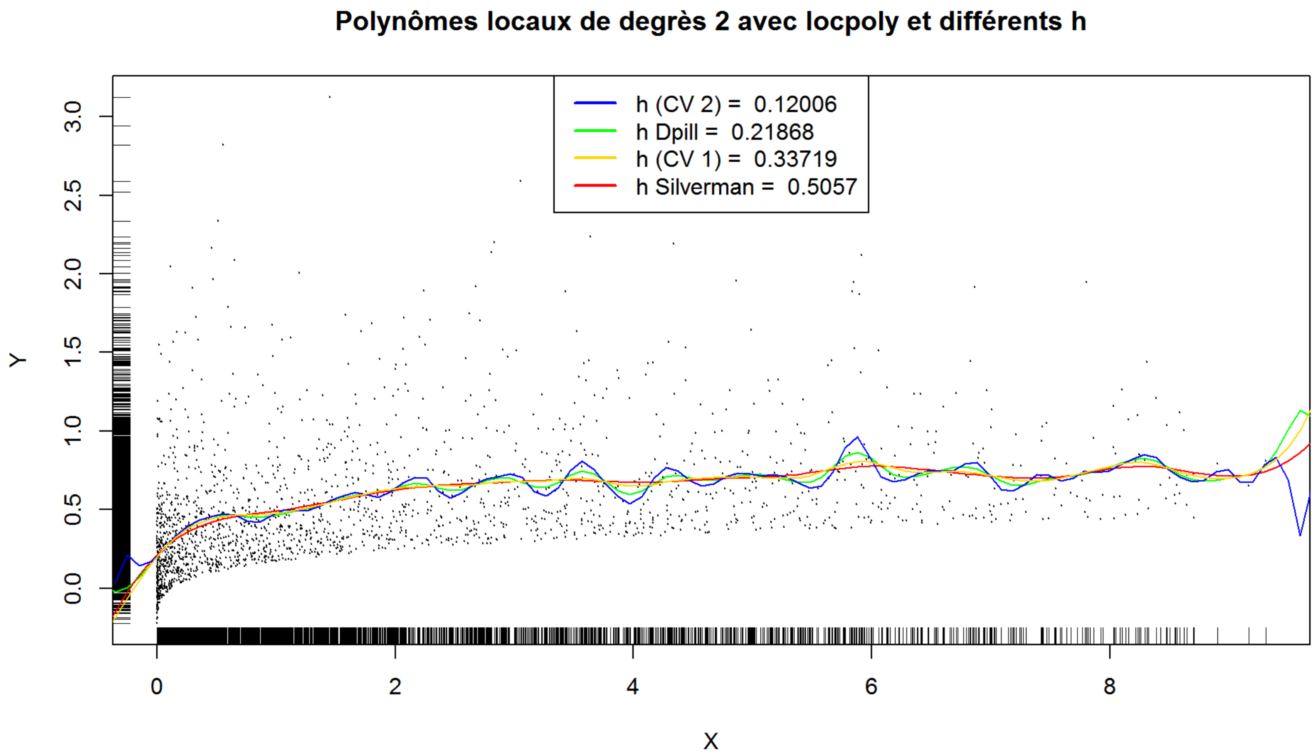
Estimateurs $\hat{r}$ de r par Nadaraya-Watson à partir de la fonction recodée NW

Utilisation de la fonction NW et différentes fenêtre h_dpill=0.2186849, h_silver=0.505695, h_CV1=0.3371859, h_CV2=0.1200601



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



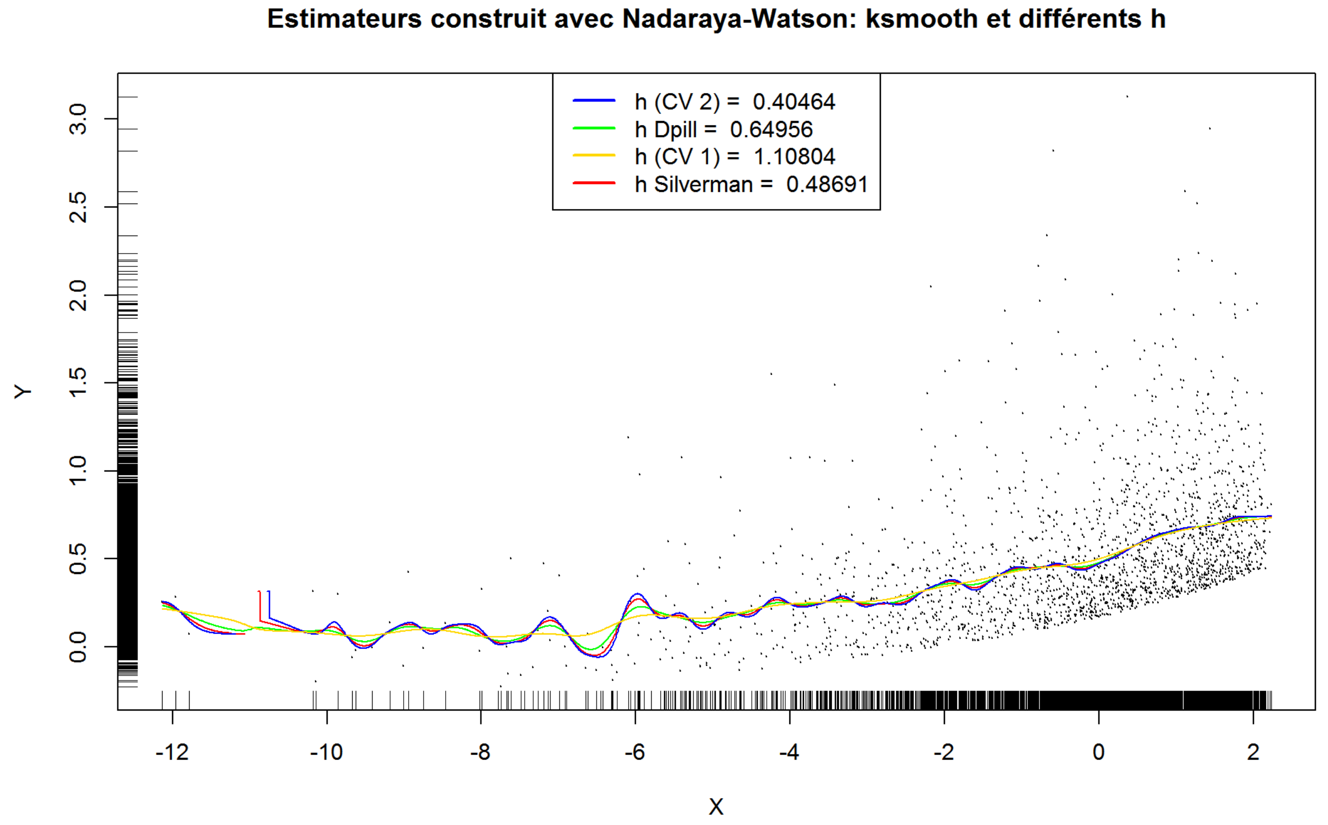
2.3. Estimation de r en regressant Y1 sur log(X)

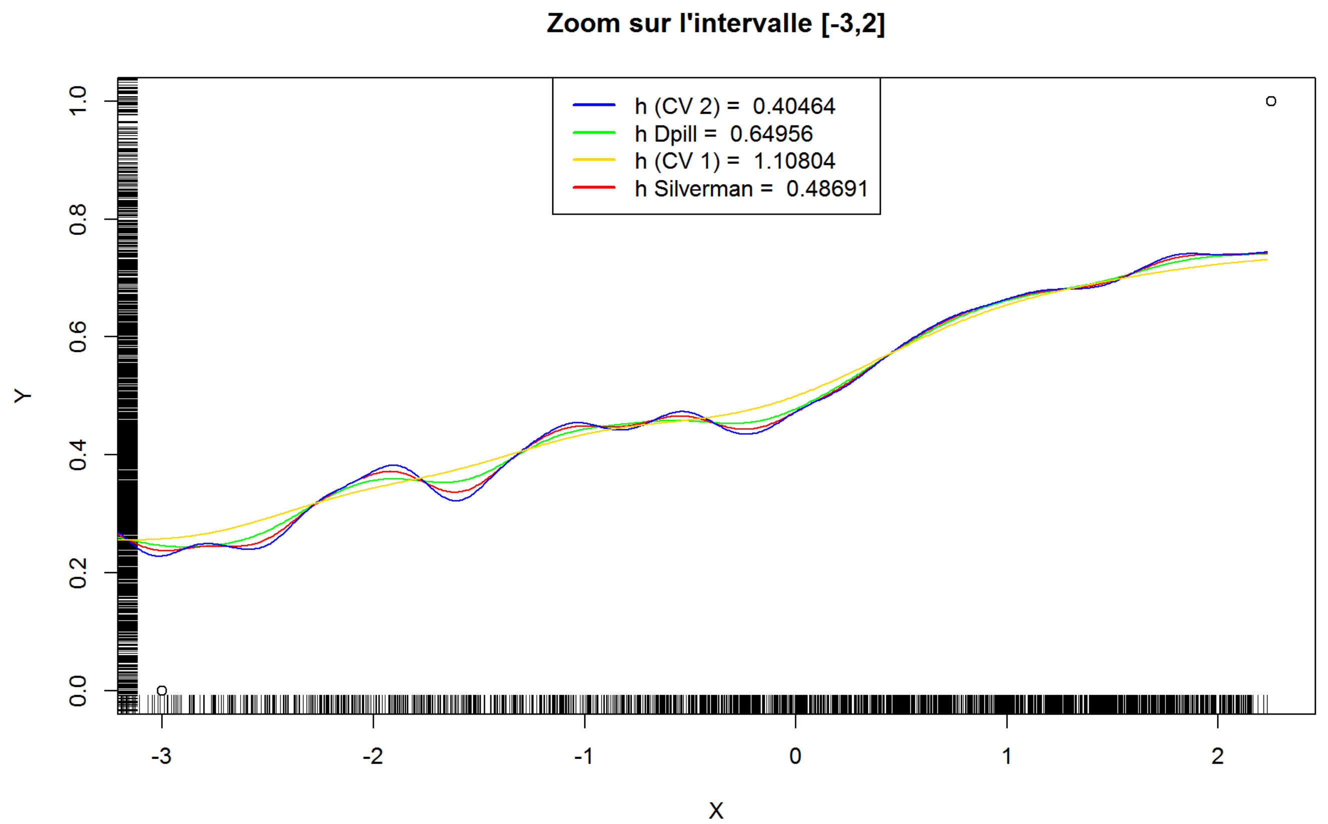
Choix du h optimal à partir de la fonction dpill, de la règle de Silverman et par validation croisée

```
## [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

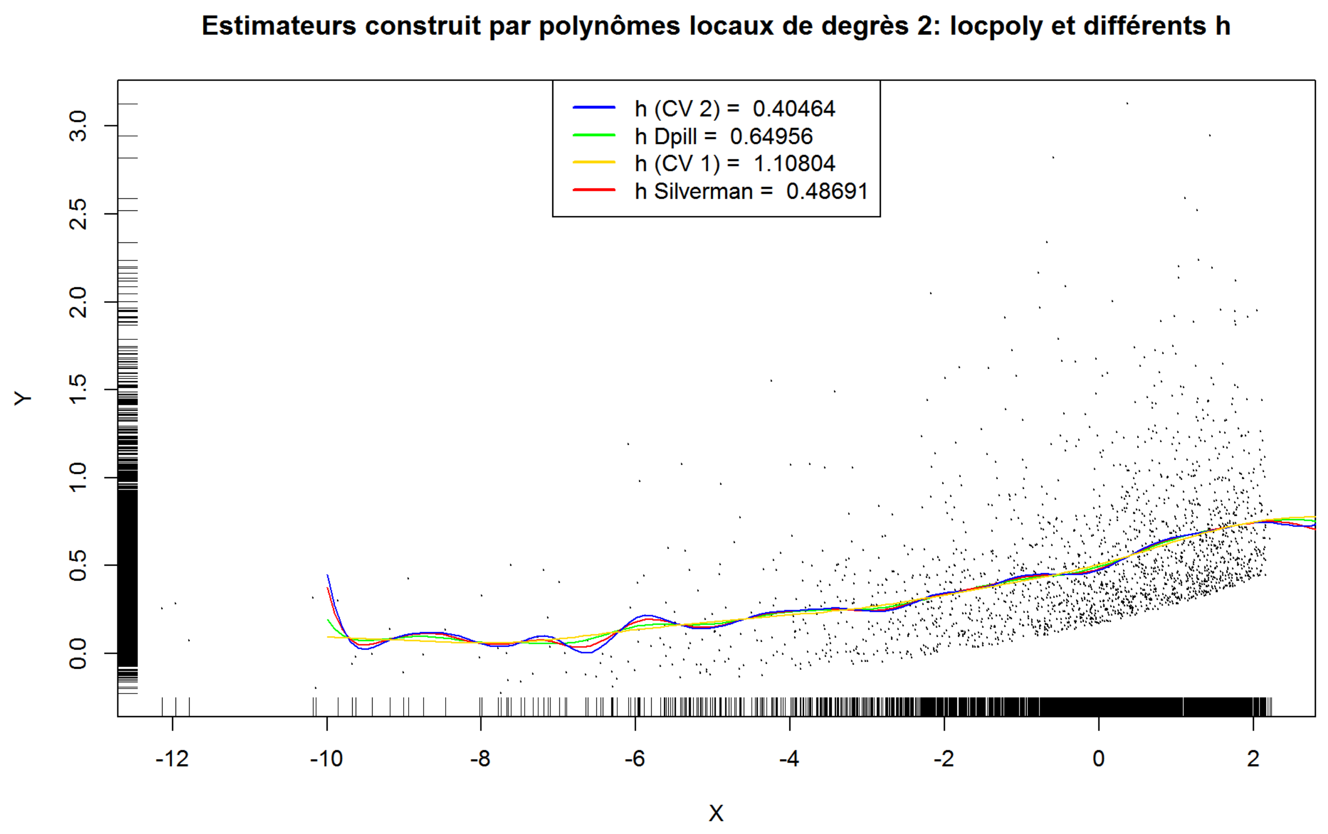
Utilisation de la fonction ksmooth avec différentes fenêtres h_dpill=0.649558, h_silverman=0.4869125, h_CV1=1.1080402, h_CV2=0.4046381

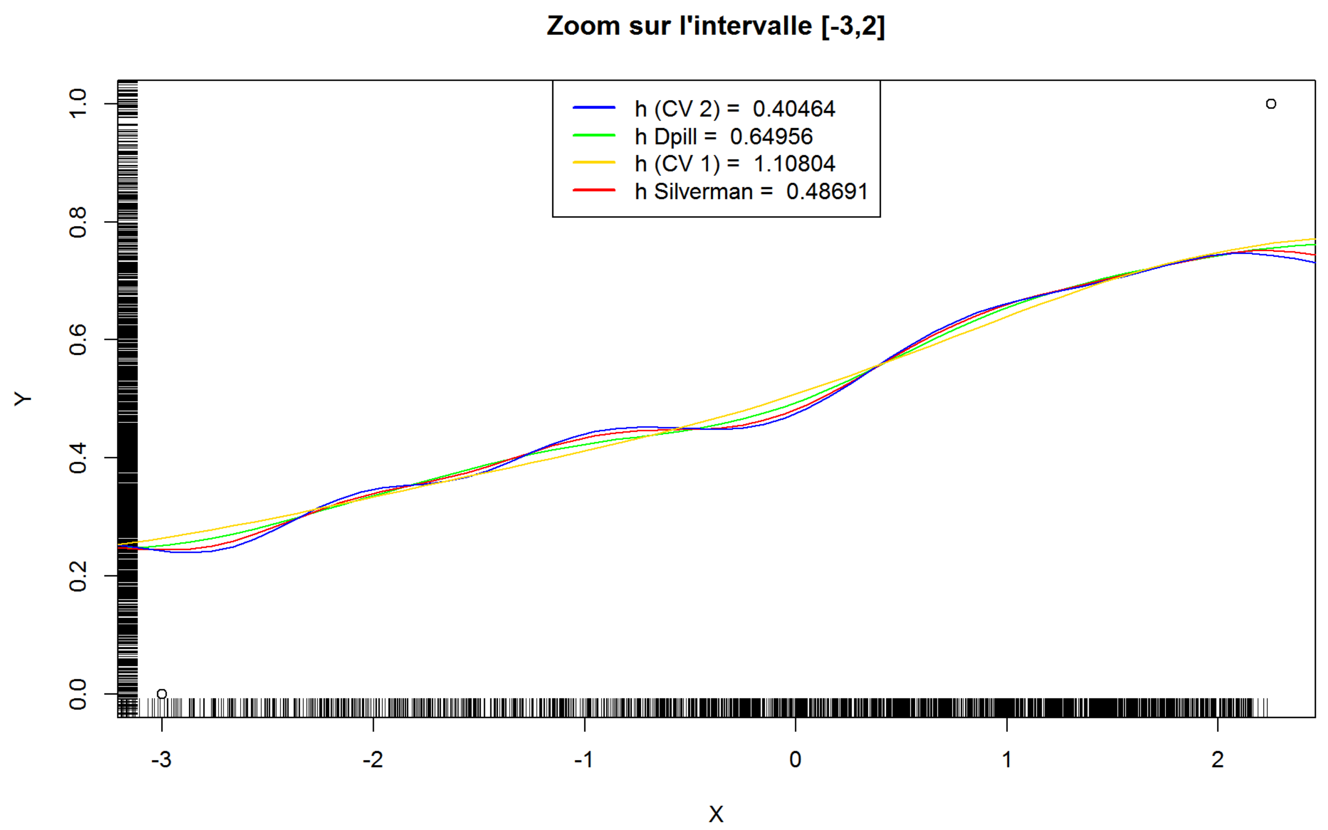




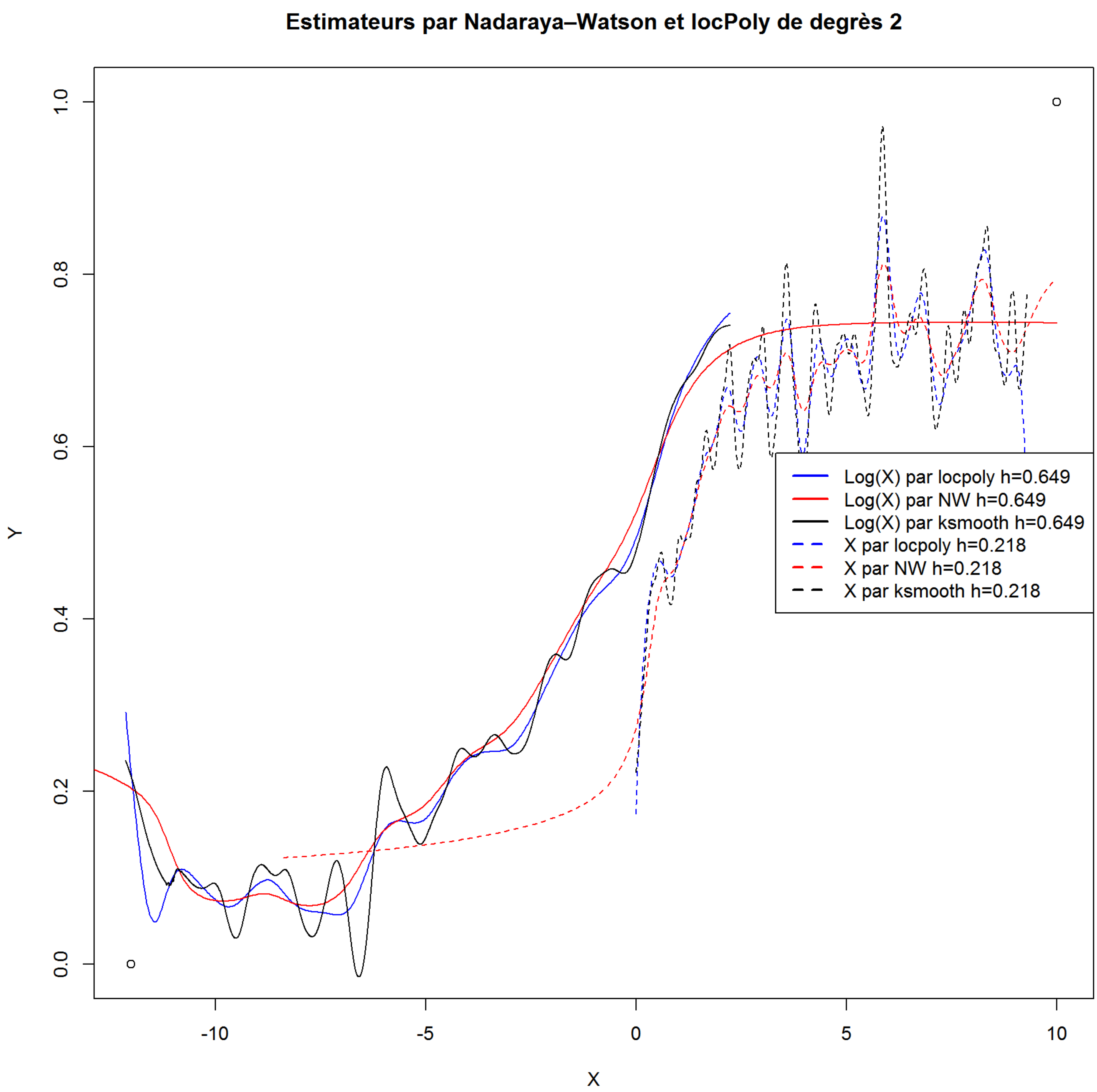
Estimateurs $\tilde{r}$ de r par polynômes locaux de degrès 2

Utilisation de la fonction locpoly avec différentes fenêtres h_dpill=0.649558, h_silverman=0.4869125, h_CV1=1.1080402, h_CV2=0.4046381





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



2.4. Remarques - Explications

Dans les zones où la densité est élevé ($log(X_i) \in [-4, 2]$ 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 densitée μ des ξ_i

3.1 A partir du jeu de donnees 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
```

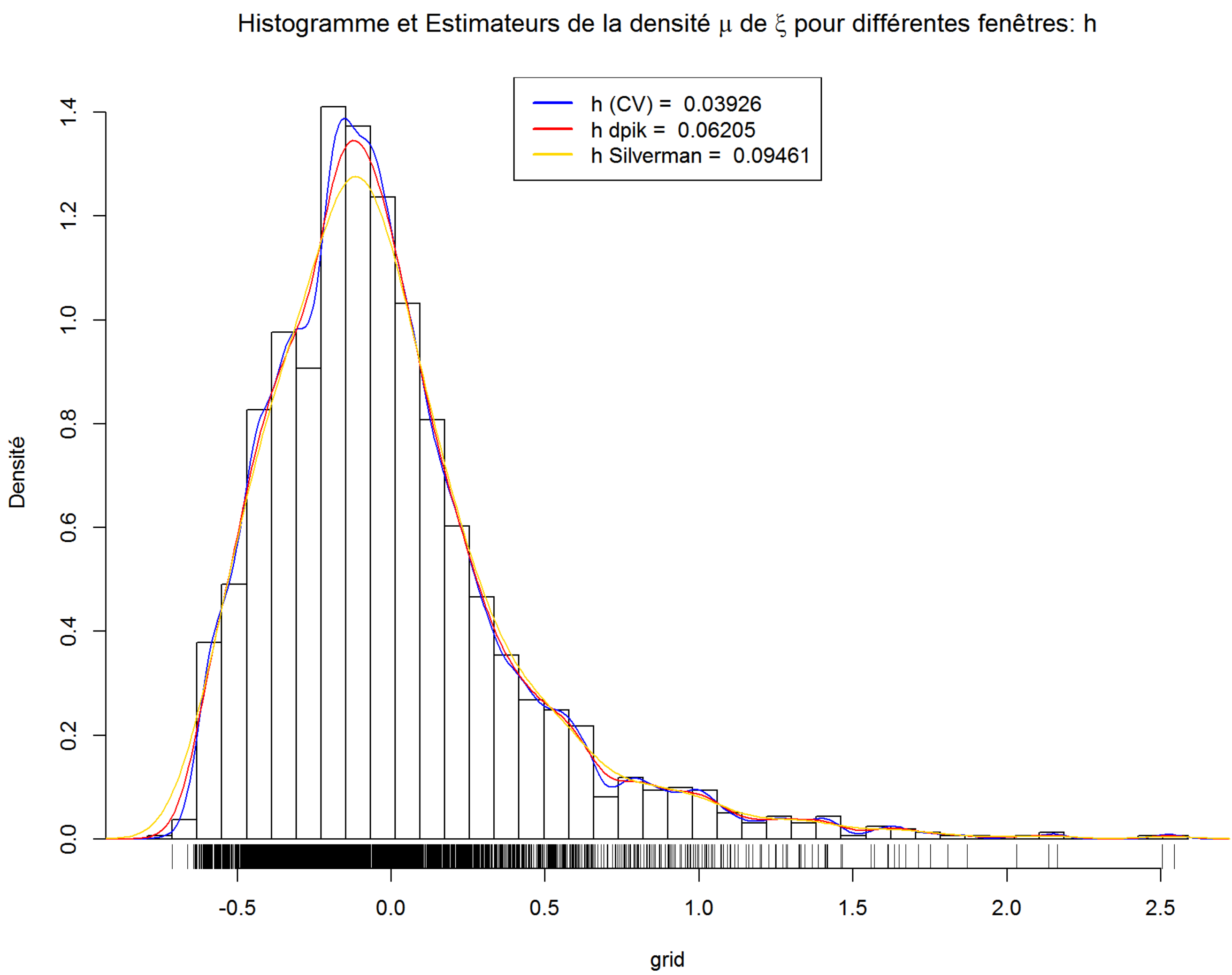
On a la représentation suivante : $Y_i - r(X_i) = \sigma\xi_i$ (cas homoscédastique σ est constant)
Par définition $\tilde{\xi_i} = Y_i - \hat{r}(X_i)$ où $\hat{r}(x)$ est un estimateur de r(x).
La distribution approximative de $\tilde{\xi_i}$ est celle de ξ_i à la constante multiplicative près σ.

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

A partir du h établi a la question 2.2: h_dpill=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.



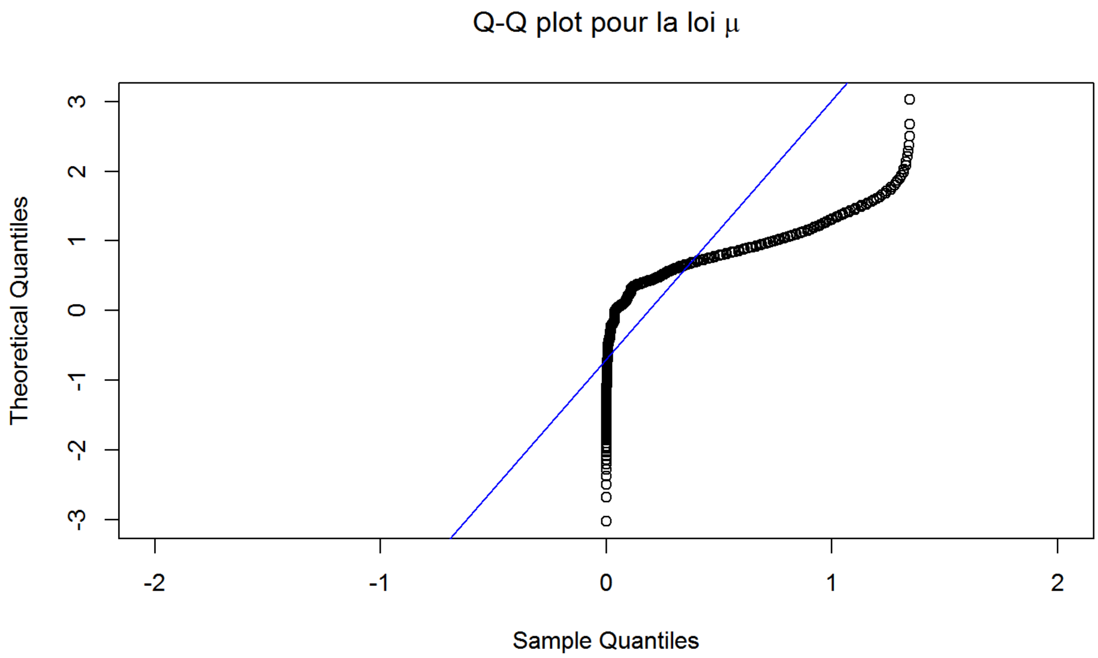
3.1.3. Interêt d’avoir decoupé le jeu de donnees selon J+ et J-

On a aisni 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 densitée 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



Le QQPlot graphique d’adéquation des quantiles rejette l’hypothèse de normalité.

- 2. test de shapiro

```
##
##  Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  nu_hdpik$y
## W = 0.7008, p-value < 2.2e-16
```

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

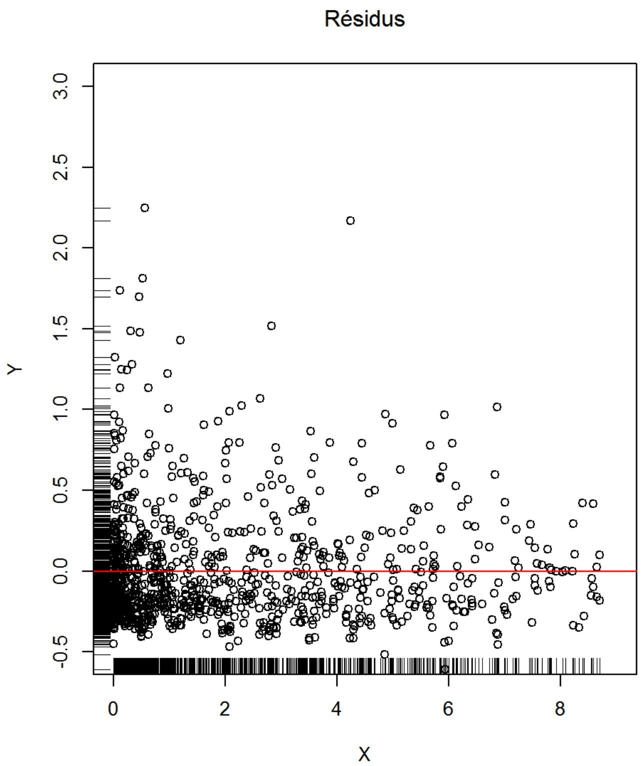
- 3. test de Kolmogorov-Smirnoff

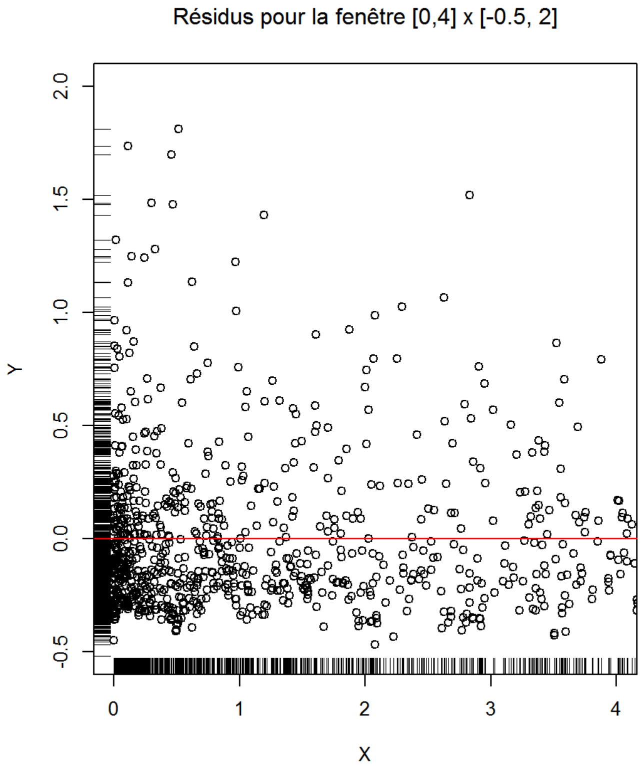
```
##
##  One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
## data:  nu_hdpik$y
## D = 0.28071, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: two-sided
```

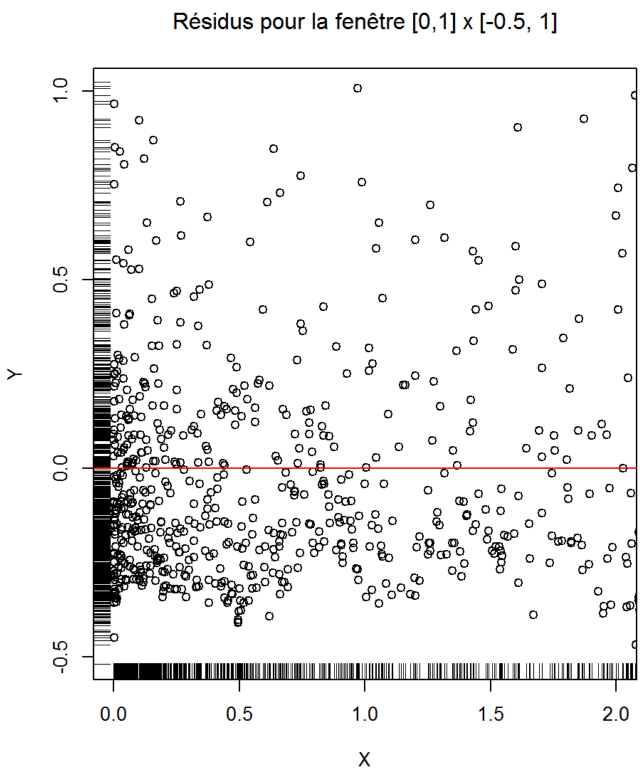
la p-value est faible l’hypothèse de normalité est rejetée. La densité μ n’est donc pas gaussienne.

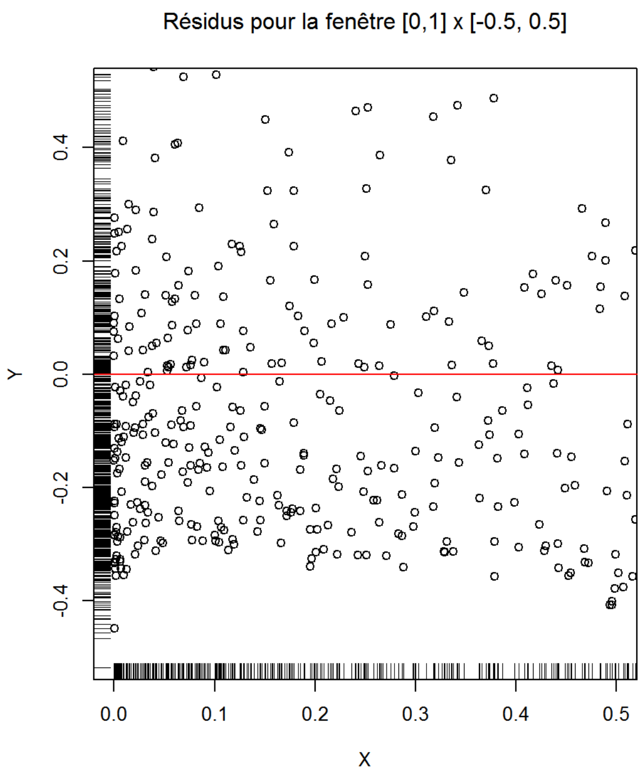
3.1.5. homoscedasticité du modèle

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









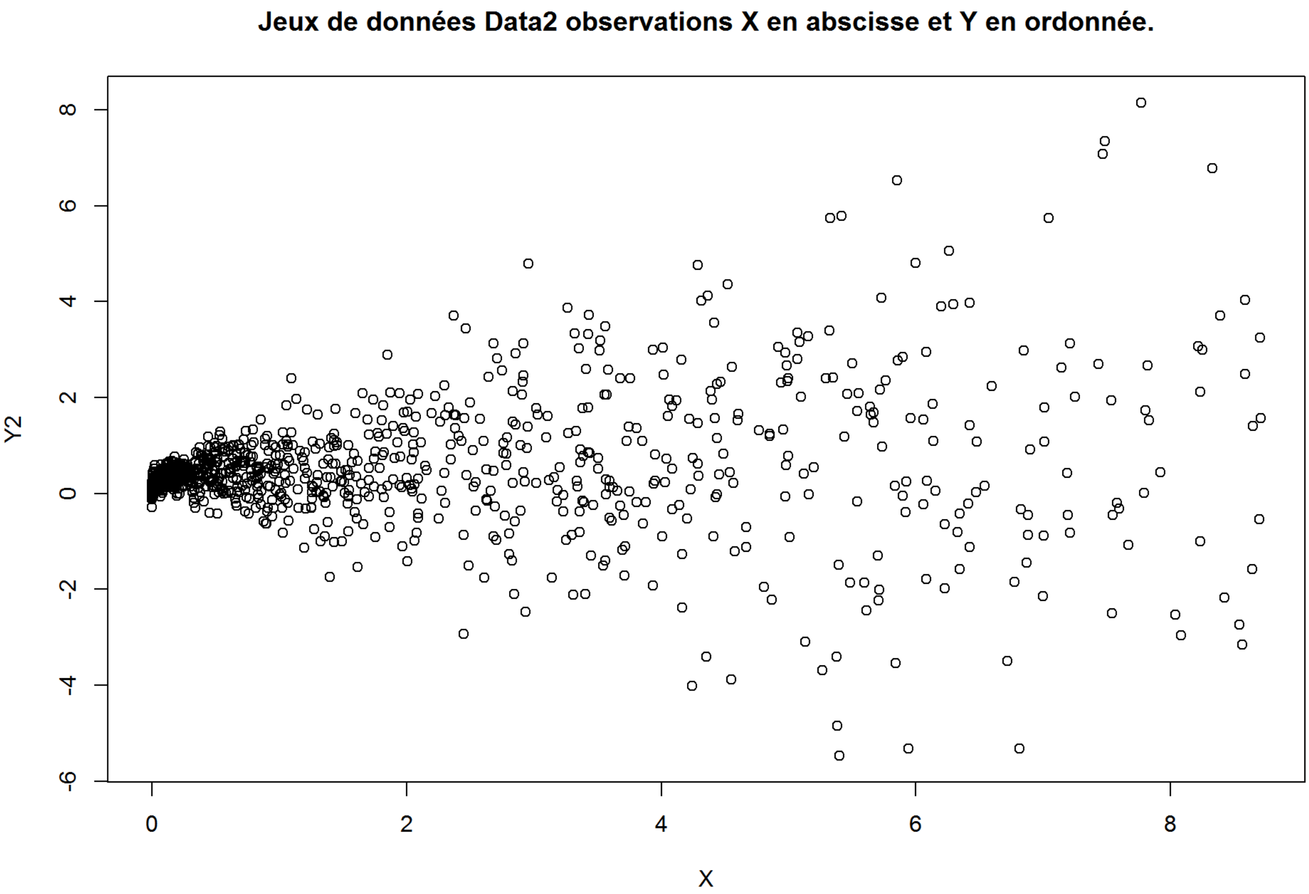
On ne remarque pas de structures particulières ou de tendances. La répartition est assez uniforme, en particuliers dans la zone de forte densité (proche de x=0). Ce qui nous ammène à penser que l'hypthèse d'homoscédasticité est bien vérifiée.

3.2 A partir du jeu de donnees Data2

On cherche a estimer μ et σ^2. Pour cela, on coupe a nouveau l'echantillon en deux et on considère a nouveau ξiy

```
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
```



3.2.1. Justifier qu'en regressant 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 on obtient $\tilde{\xi_i^2} = (r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 + \sigma(X_i)^2\xi_i^2 + 2(r(X_i) - \hat{r}(X_i))\sigma(X_i)\xi_i$

On conditionne par rapport à X_i et on utilise l'hypothèse d'indépendance de ξ_i
$E(\tilde{\xi_i^2} \mid X_i) = E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 \mid X_i) + E(\sigma(X_i)^2 \mid X_i)E(\xi_i^2) + 2E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))\sigma(X_i)) \mid X_i)E(\xi_i)$

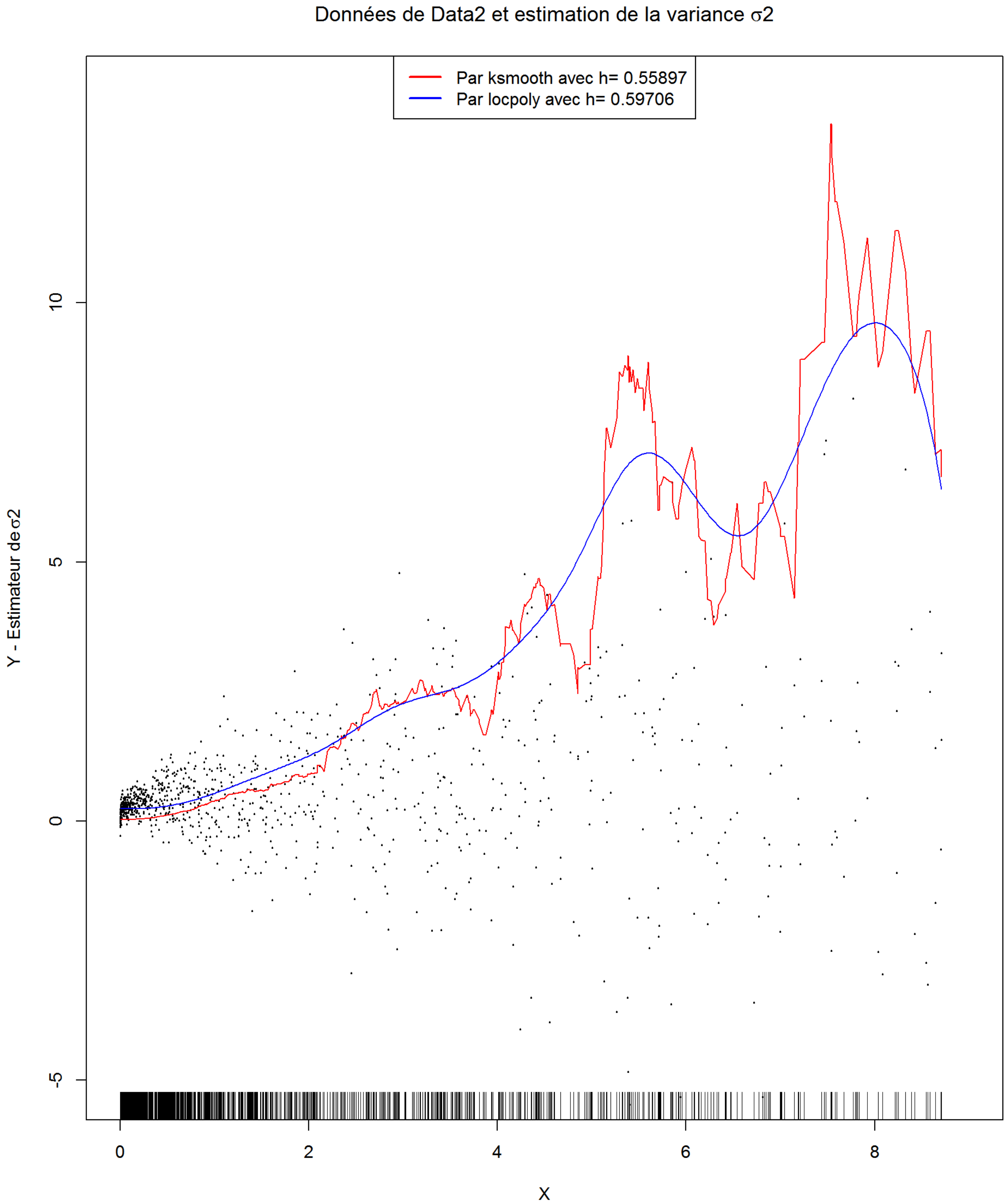
Par hypothèse $E(\xi_i) = 0$ et $E(\xi_i^2) = 1$ on a donc finalement: $E(\tilde{\xi_i^2} \mid X_i) = E((r(X_i) - \hat{r}(X_i))^2 \mid X_i) + E(\sigma(X_i)^2 \mid X_i)$

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

Comme $\hat{r}(X_i)$ est un estimateur de $r(X_i)$ on a 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 celà on construit un estimateur en regressant sur X_i le carré des résisus: $(Y_i - \hat{r}(X_i))^2$ On utilise la fonction ksmooth et locpoly (degrès 2).



En comparant au jeux de données (nuage de points Data2) on retrouve bien le résultat attendu. Peu de variance où la densité est élevé 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.

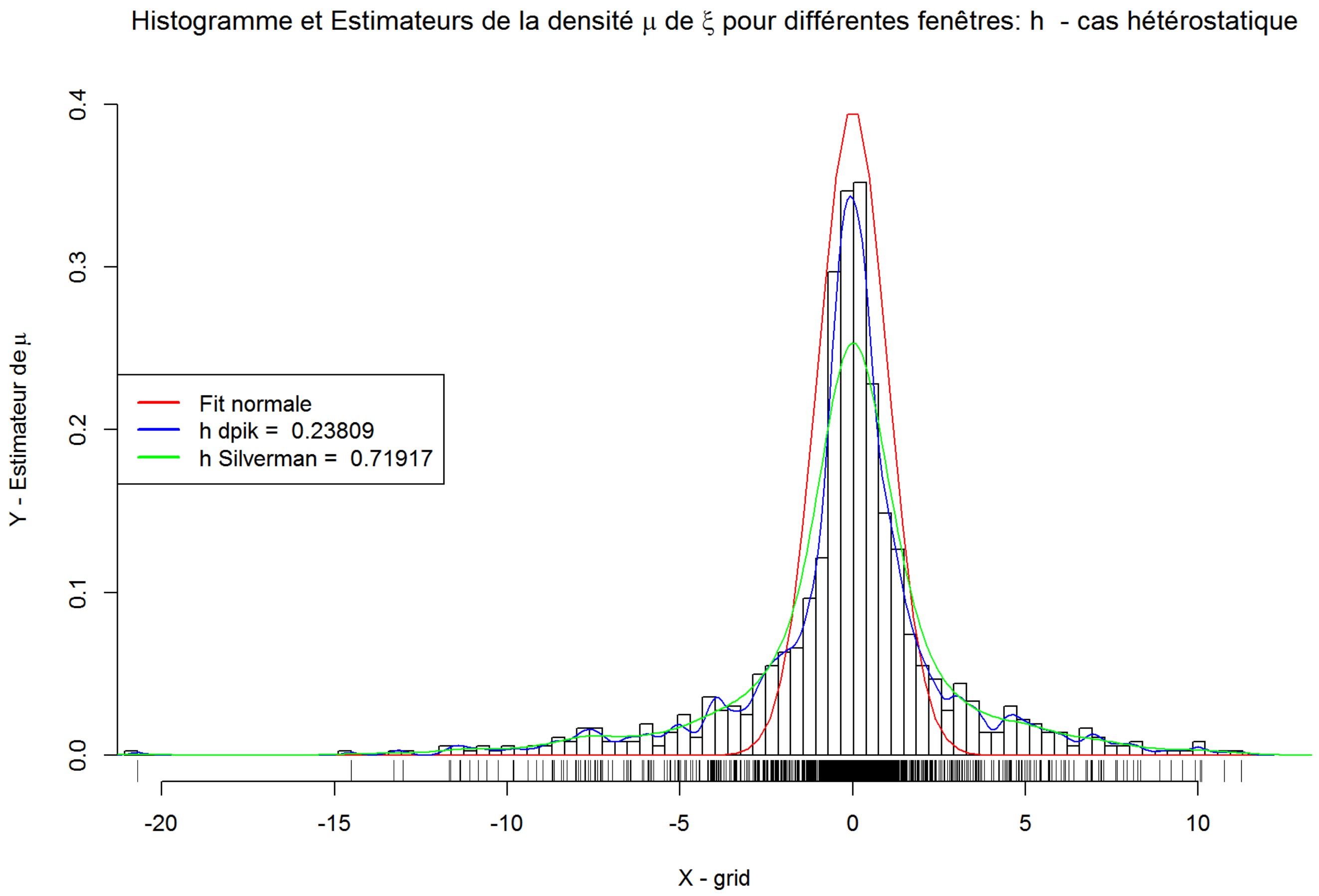
3.2.2. La densitée μ peut-elle être gaussienne

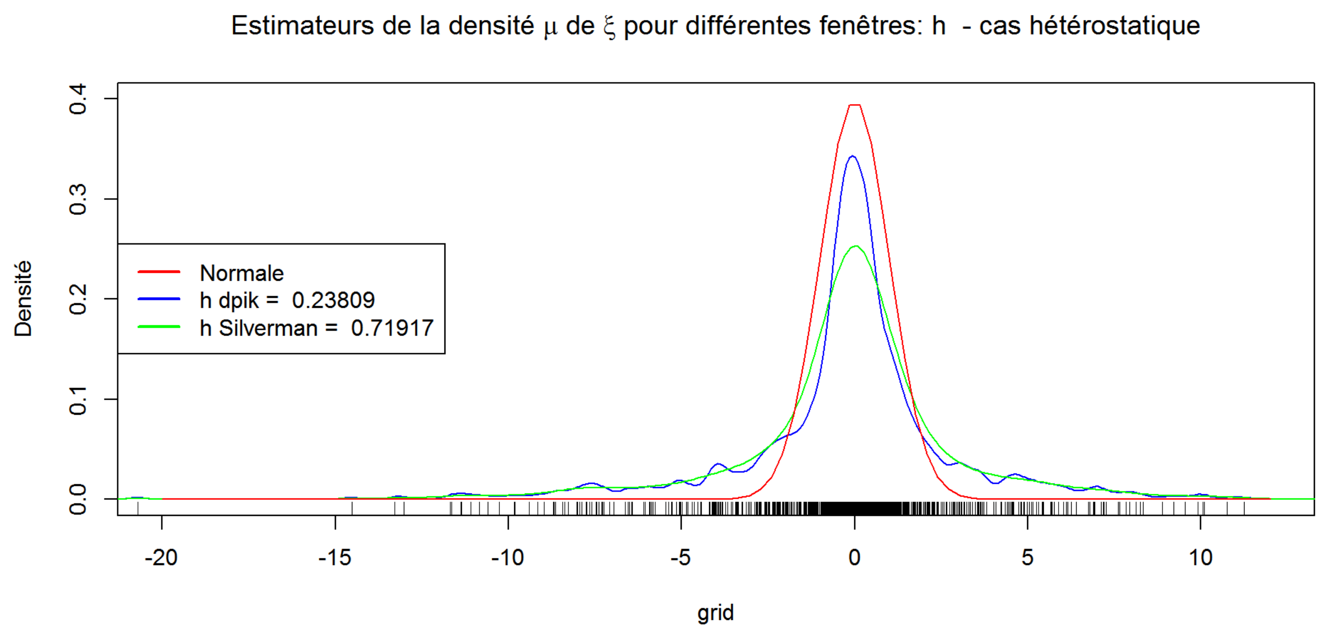
On estime la densité $\mu(x)$ des ξ_i à partir de l'estimation $(Y_i - \hat{r}(X_i))/\hat{\sigma}^2(X_i)$ où $\hat{\sigma}^2(X_i)$ est l'estimateur de $\sigma^2(X_i)$ obtenu précédement.

- 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"
```

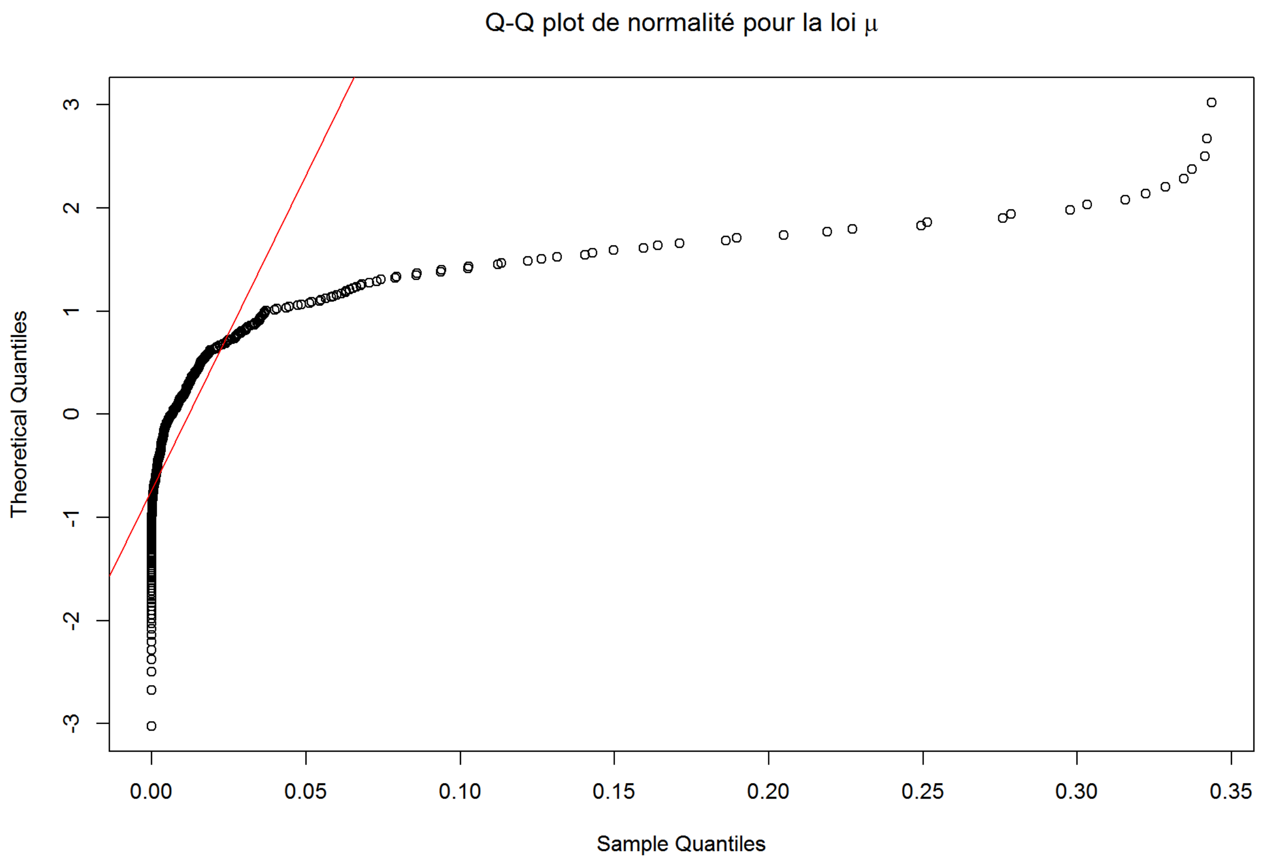
- On estime la densité à partir de la fonction bkde que l'on représente graphiquement:





A la vue des graphiques la densité $\mu(x)$ ne semble pas être gaussienne. On a cependant gagné en symétrie par rapport au cas précédent étudié au §3.1.4 On va vérifier celà avec un QQPtot et des tests. La fonction que l'on étudie est la fonction obtenue à partir de la méthode bkde de R pour la fenêtre h : h=0.2380948

- 1- test du QQPlot



L'hypothèse de normalité est rejettée. Ou bien gaussien sur un intervalle très faible, autour de 0:]0+,0.02[

- 2- test de shapiro

```
shapiro.test(mu_hdpik$y)
```

```
##
##  Shapiro-Wilk normality test
##
## data:  mu_hdpik$y
## W = 0.48829, p-value < 2.2e-16
```

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

- 3- test de Kolmogorov-Smirnoff

```
ks.test(mu_hdpik$y,"pnorm",mean(mu_hdpik$y),sd(mu_hdpik$y))
```

```
##
##  One-sample Kolmogorov-Smirnov test
##
## data:  mu_hdpik$y
## D = 0.32259, p-value < 2.2e-16
## alternative hypothesis: two-sided
```

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