# PARTIE 2: INTRODUCTION À LA STATISTIQUE NON PARAMÉTRIQUE

Irene Balelli

Centre Inria d'Université Côte d'Azur

**irene.balelli@inria.fr**

# OBJECTIFS ET PRINCIPAUX THÈMES ABORDÉS

1. Introduction : qu'est-ce que la statistique non paramétrique ?
2. Rappels sur la fonction de densité
3. Estimateur de la densité par Histogramme
4. Estimateur de la densité à noyau
5. La régression non paramétrique
6. Estimateur par régressogramme de la fonction de régression
7. Régression par la méthode du noyau
8. Prévision non paramétrique
9. Quelques tests non paramétriques

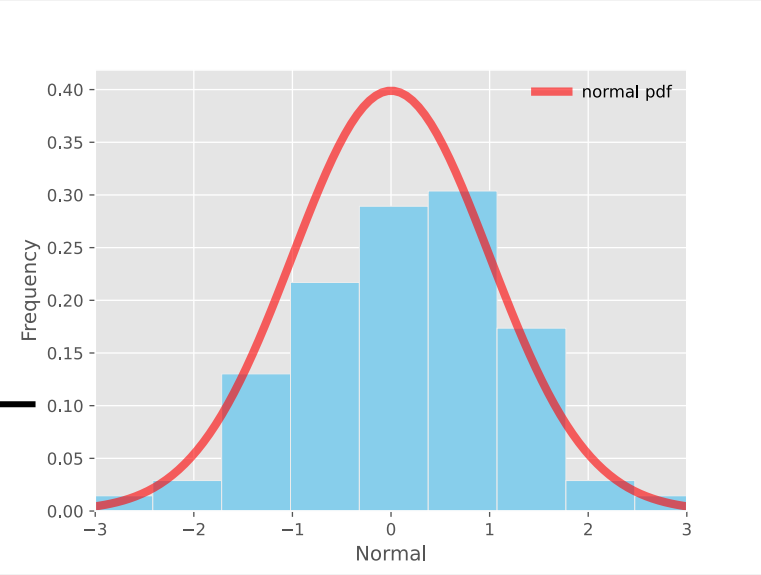
# I. INTRODUCTION :
## QU'EST-CE QUE LA STATISTIQUE NON PARAMÉTRIQUE ?

# INTRODUCTION : QU'EST-CE QUE LA STATISTIQUE NON PARAMÉTRIQUE ?

- **Statistique paramétrique:**
  - La loi de l'échantillon qu'on souhaite analyser est supposée être connue, e.g. Gaussienne
  - D'où, le nombre de paramètre à estimer = nombre de paramètres inconnus du modèle choisi, e.g. la moyenne et la variance pour le modèle gaussien

$$x \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2) \Rightarrow f_{\mu,\sigma}(x) := \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2}$$

2 paramètres inconnus



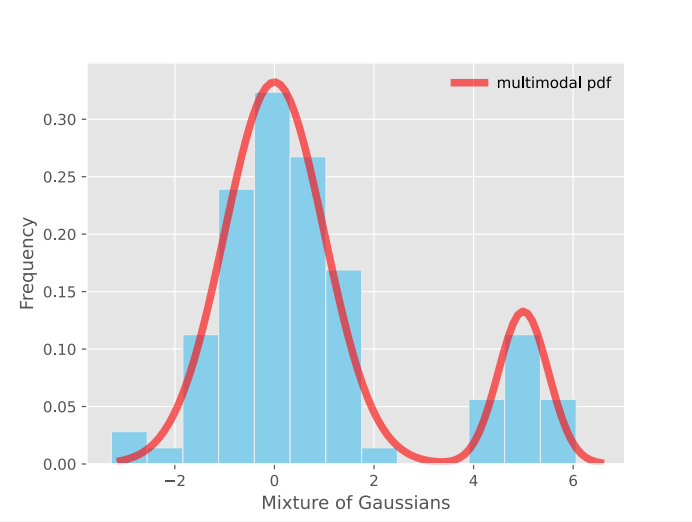

  - **Partie I :** plusieurs méthodes pour estimer les paramètres inconnus, étant donné modèle + échantillon (e.g. méthode des moments, maximum de vraisemblance)

- **Statistique non paramétrique:**
  - Pas d'informations concernant la distribution de la population observée → pas de modèle a priori
  - La distribution doit être entièrement apprise à partir de données
  - Nous pouvons faire de hypothèse sur la famille des distributions possibles : forme, nature, type, support, dérivabilité etc.

# INTRODUCTION : QU'EST-CE QUE LA STATISTIQUE NON PARAMÉTRIQUE ?

- **Estimation non paramétrique : inconvénients**
  1. Le poids des données : plus sensible au bruit et à l'échantillon d'entrainement.
  2. Généralement, un grand nombre d'exemples est nécessaire pour assurer une bonne couverture de l'espace ➔ une bonne estimation de la densité d'où la population a été tirée, surtout si haute dimension.
  3. Un petit nombre de paramètres est suffisant pour décrire l'échantillon dans un contexte paramétrique (compression de l'information) : l'échantillon d'entrainement doit être stocké dans le cas non paramétrique pour la prédiction → mémoire.
  4. Plus lent en phase de déploiement.

- **Estimation non paramétrique : avantages**
  1. Généralement, nous ne connaissons pas la « vrai » densité de probabilité. Avoir un a priori sur le modèle peut induire en erreur, si cet a priori n'est pas correct, e.g. une hypothèse Gaussienne unimodale alors que la distribution est en réalité multimodale →
  2. Si nous n'arrivons pas à ajuster les observations à aucune distribution paramétrique ou nous ne savons pas e.g. le nombre de composantes à mettre dans un mélange
  3. En cas de haute dimension, un modèle paramétrique peut être difficile à estimer en raison du nombre élevé de paramètres à estimer → problèmes d'identifiabilité



# INTRODUCTION : QU'EST-CE QUE LA STATISTIQUE NON PARAMÉTRIQUE ?

| Paramétrique | Non paramétrique |
|---|---|
| La population es bien connue | Aucune information sur la population n'est disponible |
| Hypothèses sur la population et sa « vrai » distribution | Aucune hypothèse n'est faite sur la population/distribution |
| Echantillon des données basé sur la distribution | Echantillons de données arbitraires |

# 2. RAPPELS SUR LA FONCTION DE DENSITÉ

# RAPPELS SUR LA FONCTION DE DENSITÉ

- Soit $X$ un variable aléatoire continue, i.e. définie sur $\mathbb{R}$ (support infini) ou un intervalle borné $C \subset \mathbb{R}$ (support fini).
- Dans ce cas, pour tout $(a, b) \in \mathbb{R}^2, a < b$, la probabilité que la variable $X$ se trouve dans l'intervalle $[a, b]$ est déterminée à travers sa fonction de densité, $f_X$, à l'aide d'un calcul intégrale :

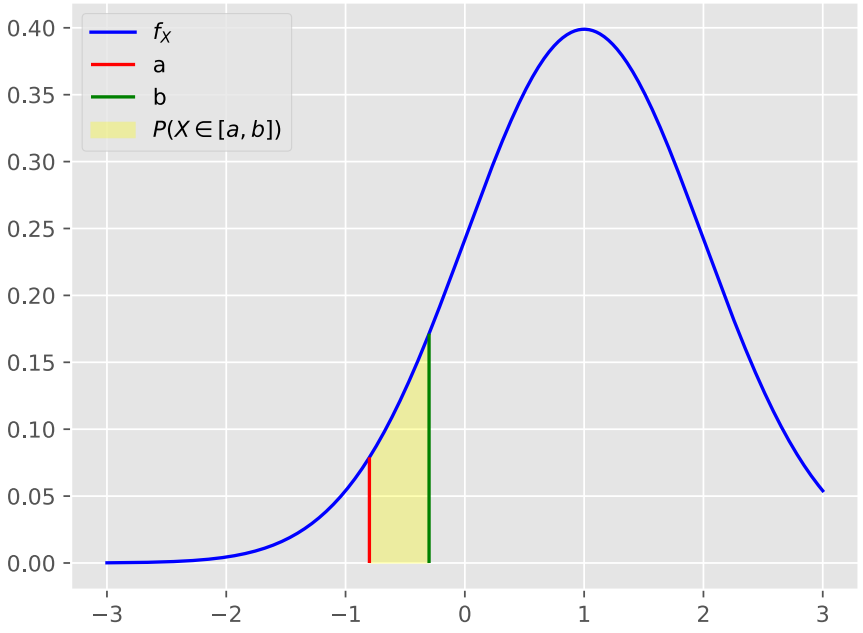
$$P(X \in [a, b]) := \int_a^b f_X(x)dx$$

En autre termes, pour $\epsilon \to 0$, $P(X \in [a, a + \varepsilon]) \approx \varepsilon f_X(a)$

Quelques exemples de variables aléatoires à densité :

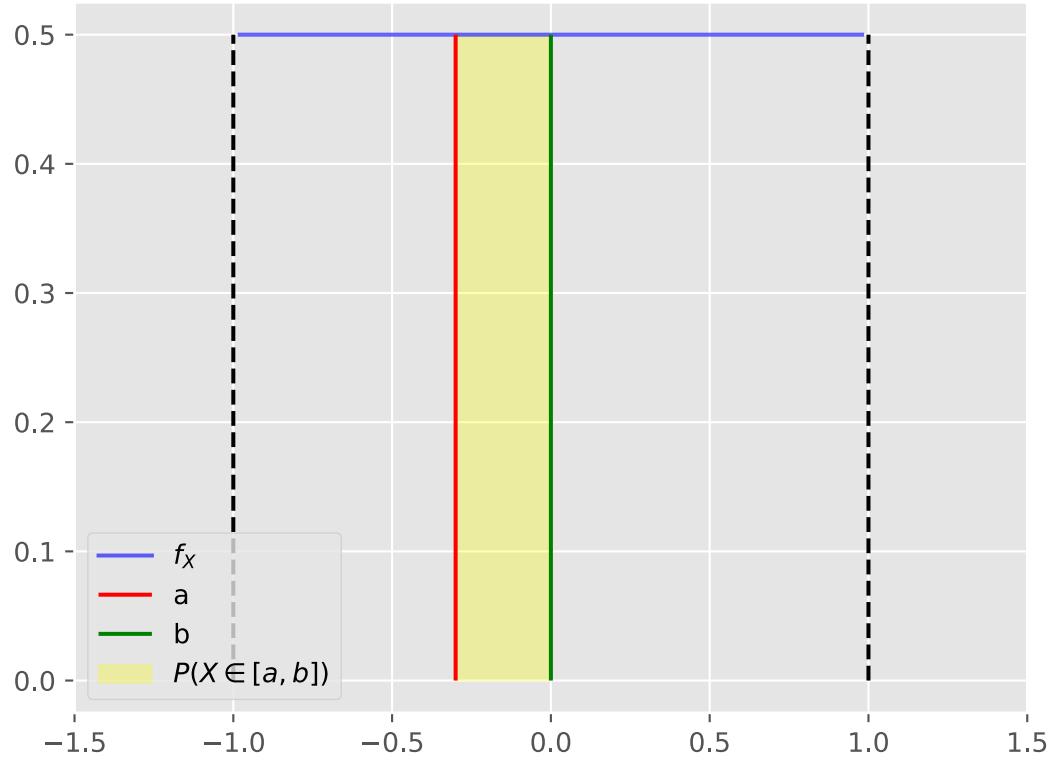
- Loi gaussienne (support = $\mathbb{R}$)
- Loi exponentielle (support = $\mathbb{R}^+$)
- Loi uniforme, loi triangulaire (support borné)

- Extension naturelle à des variables continues vectorielles ($\mathbb{R}^d$)

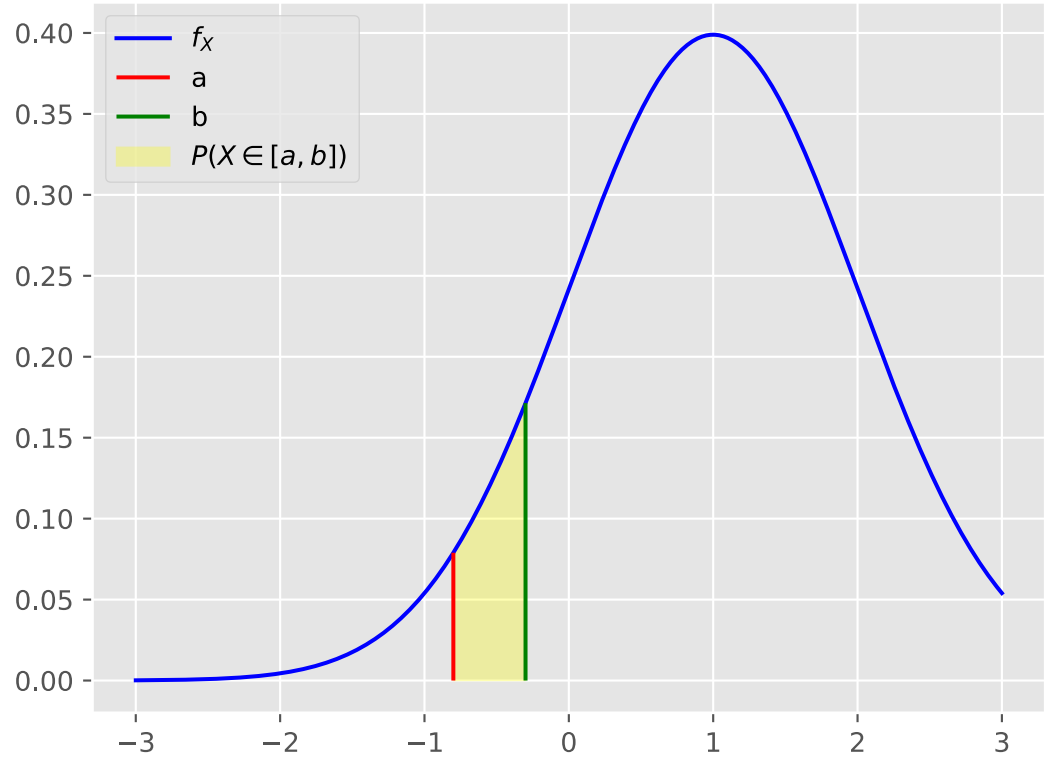


# RAPPELS SUR LA FONCTION DE DENSITÉ

Uniforme : $X \sim \mathcal{U}([-1,1]), supp_X = [-1,1]$




Gaussian : $X \sim \mathcal{N}(0,1), supp_X = \mathbb{R}$



# RAPPELS SUR LA FONCTION DE DENSITÉ

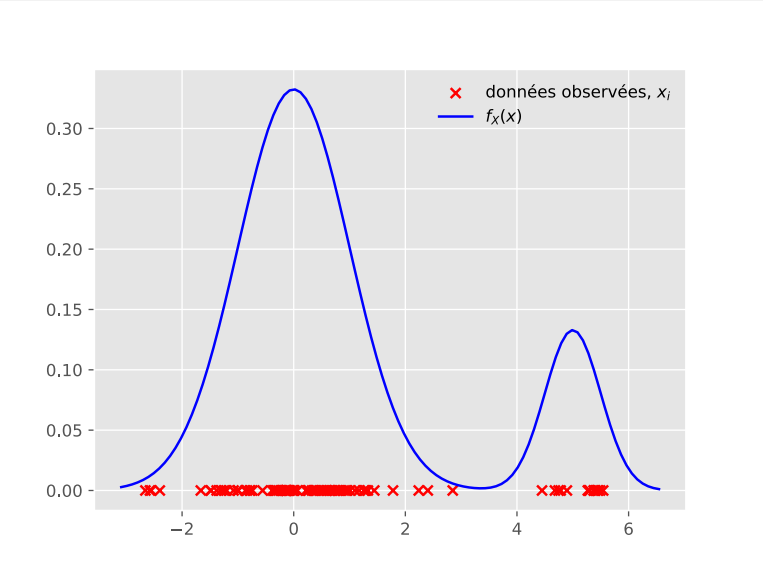
**Propriétés de la fonction de densité $f_X$ d'une variable $X$ :**

- $f_X(x) \geq 0$ pour tout $x$ dans son support, et elle est intégrable
- L'intégrale de $f_X$ sur son support est égale à 1 : $$\int_{\mathrm{supp}_X} f_X(x)dx = 1$$
- Lien avec le moment d'ordre $k$ de $X$ (sous condition que l'intégrale correspondant existe et soit fini) :

$$\mathbb{E}[X^k] := \int_{\mathrm{supp}_X} x^k f_X(x)dx$$

# PROBLÈME : ESTIMATION DE LA DENSITÉ

Comment estimer une densité inconnue, à partir uniquement d'un échantillon observé ?



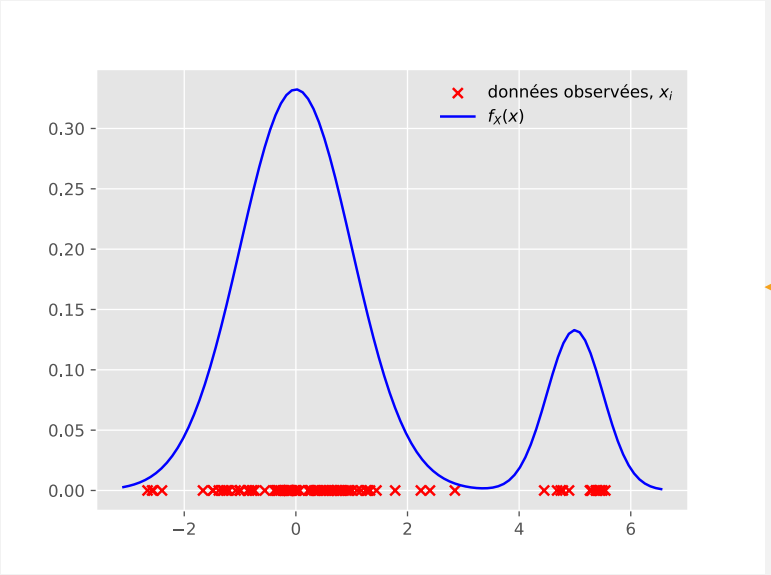

Soit $\mathcal{D}_N := \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}$ un échantillon aléatoire composé de $N$ observations : de quelle densité $f$ est-il issu ?

Répondre à cette question peut nous apporter plusieurs informations :

- Quelles sont les régions à densité élevée ?
- Unimodale ou multimodale ?
- Quel est le support de la distribution ?
- Y a-t-il des outliers dans mon échantillon ?
- Quoi s'attendre d'un modèle décisionnel construit sur la base de cette densité ?

# PROBLÈME : ESTIMATION DE LA DENSITÉ

Comment estimer une densité inconnue, à partir uniquement d'un échantillon observé ?




**Approches non paramétriques:**

1. Estimation par histogramme
2. Estimation par noyaux
3. Estimation par k-plus-proches-voisins

Soit $\mathcal{D}_N := \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^d$ un échantillon aléatoire composé de $N$ observations : de quelle densité $f$ est-il issu ?

Répondre à cette question peut nous apporter plusieurs informations :

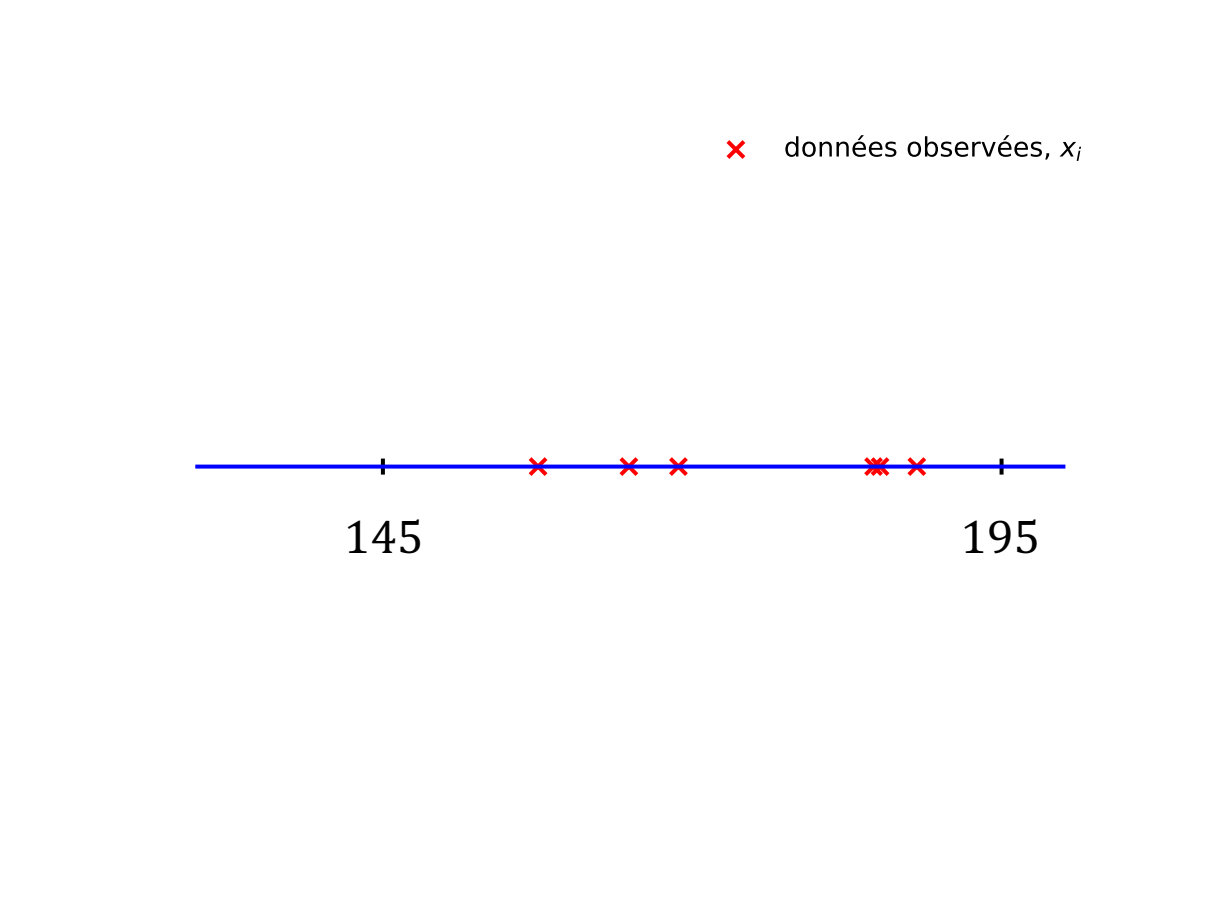
- Quelles sont les régions à densité élevée ?
- Unimodale ou multimodale ?
- Quel est le support de la distribution ?
- Y a-t-il des outliers dans mon échantillon ?
- Quoi s'attendre d'un modèle décisionnel construit sur la base de cette densité ?

# 3. ESTIMATEUR DE LA DENSITÉ PAR HISTOGRAMME

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

La méthode plus intuitive et élémentaire d'estimation de la densité est l'histogramme. Pour le construire on doit suivre 3 simples étapes.

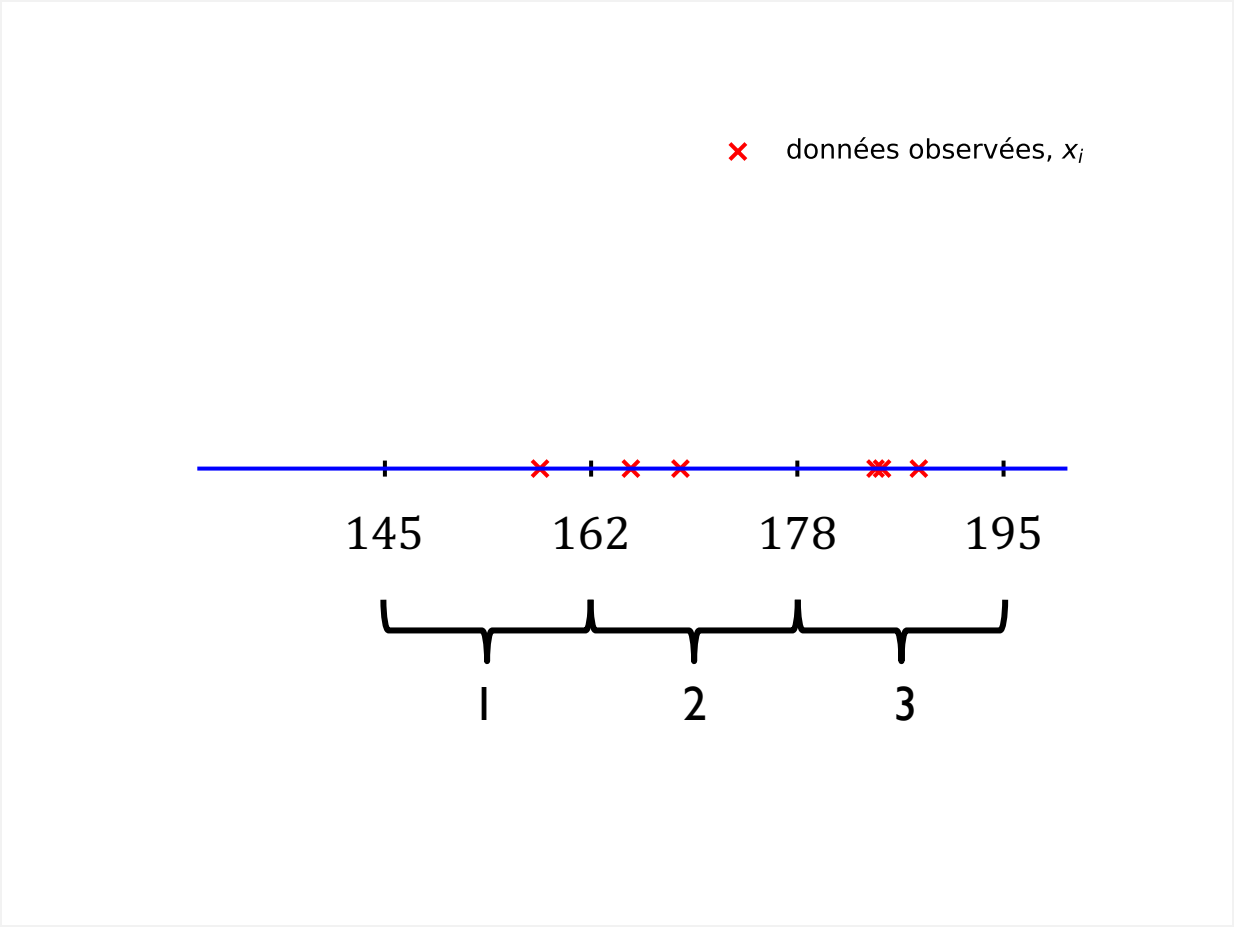
Supposons, pour simplicité, d'avoir un échantillon composé de 6 observations (la taille, en cm, de 6 personnes adultes – hommes et femmes) :



# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

La méthode plus intuitive et élémentaire d'estimation de la densité est l'histogramme. Pour le construire on doit suivre 3 simples étapes.

1. Nous allons diviser l'espace des observations en intervalles (ou « boîtes » dans le cas multidimensionnel), de même taille :



# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

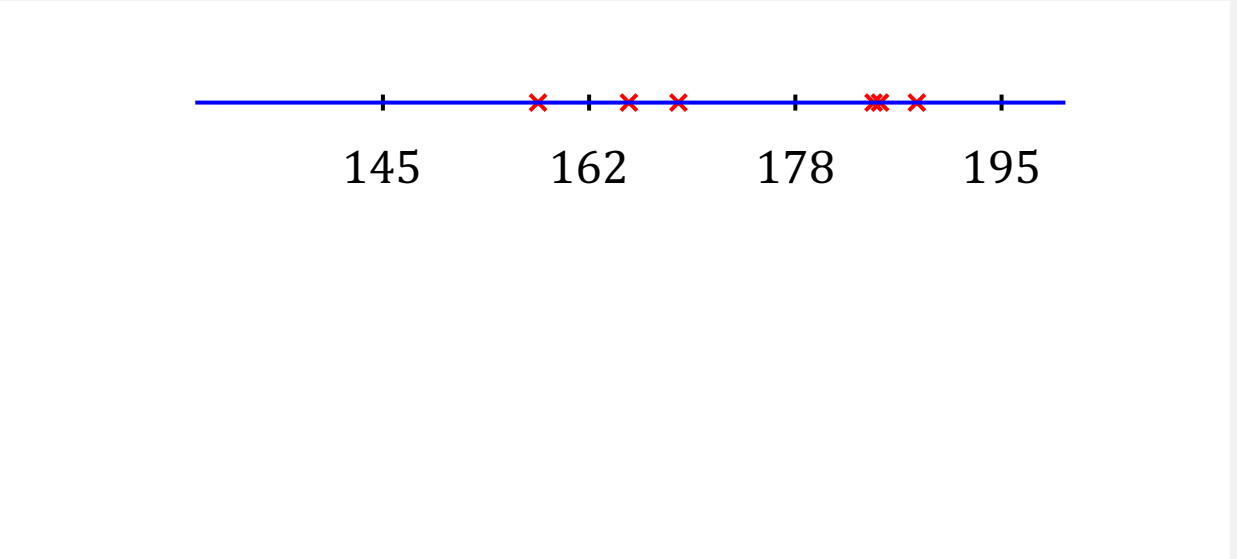
La méthode plus intuitive et élémentaire d'estimation de la densité est l'histogramme. Pour le construire on doit suivre 3 simples étapes.

2. Nous approximons la densité de chaque intervalle avec la fréquence des observations qu'il contient (probabilité empirique) :

$$\forall i = 1, \ldots, \text{nombre intervalles}, f_i := \frac{N_i}{N}$$

Nombre d'observations dans le $i$-ème intervalle

Nombre total d'observations



# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

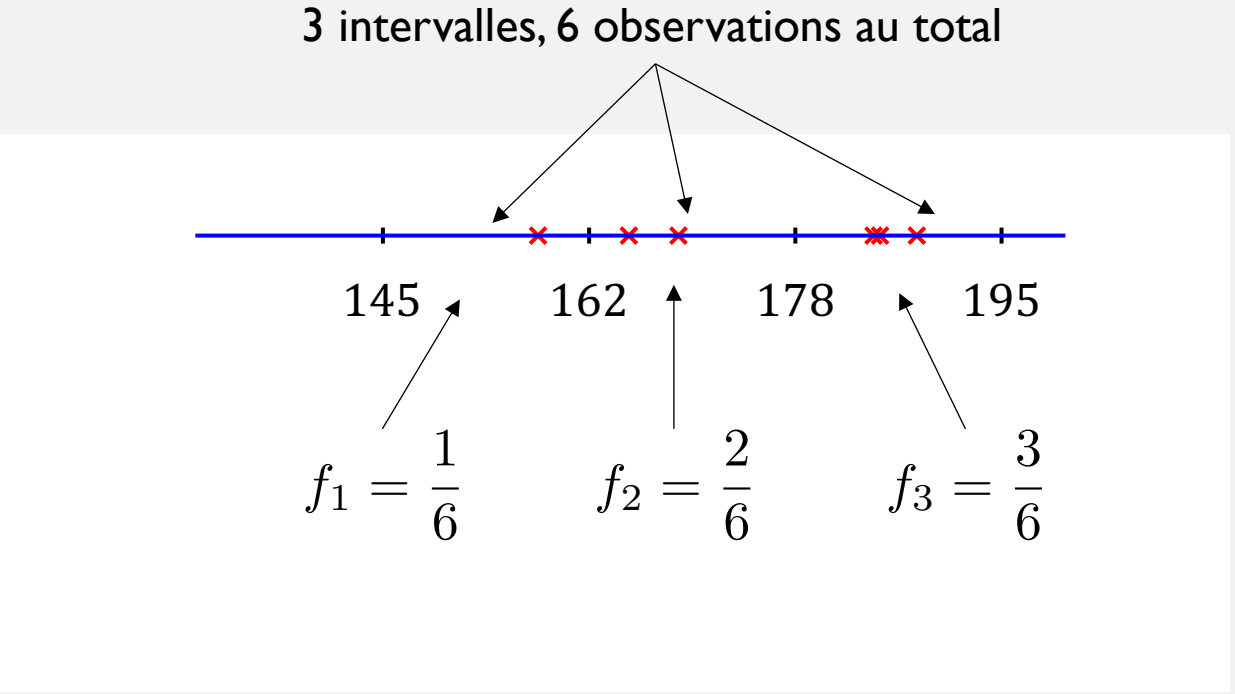
La méthode plus intuitive et élémentaire d'estimation de la densité est l'histogramme. Pour le construire on doit suivre 3 simples étapes.

2. Nous approximons la densité de chaque intervalle avec la fréquence des observations qu'il contient (probabilité empirique) :

$$\forall i = 1, \ldots, \text{nombre intervalles}, f_i := \frac{N_i}{N}$$

Nombre d'observations dans le $i$-ème intervalle

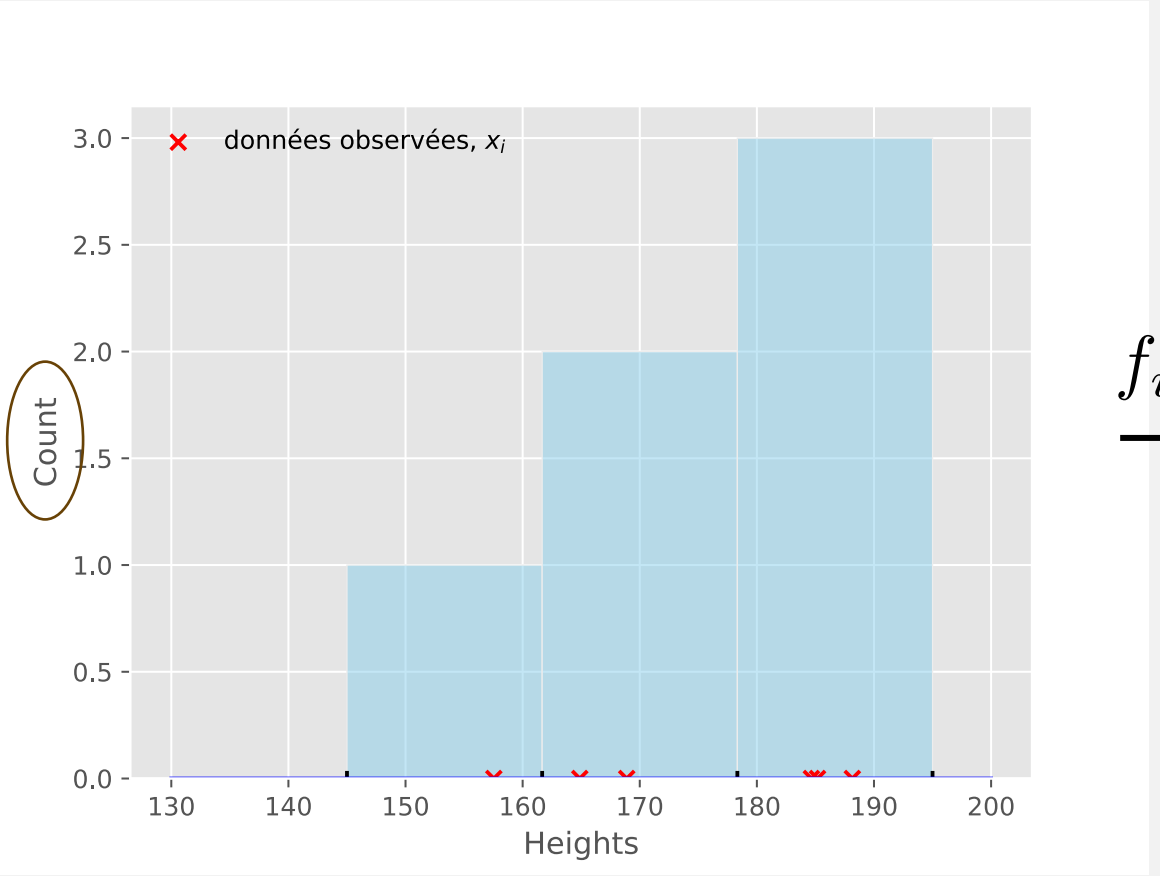
Nombre total d'observations



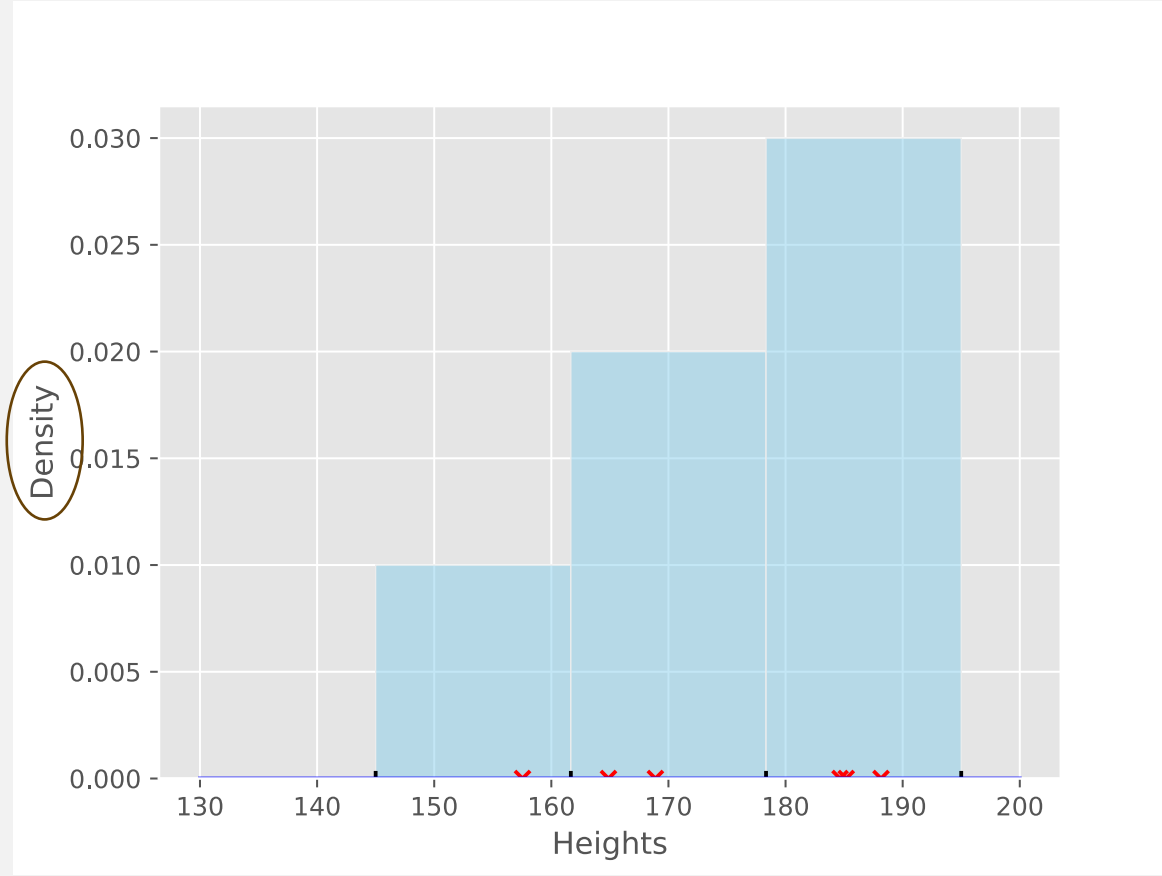
# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

La méthode plus intuitive et élémentaire d'estimation de la densité est l'histogramme. Pour le construire on doit suivre 3 simples étapes.

3. Nous divisons ensuite par la longueur (ou volume) de l'intervalle (boîte), supposée ici constante, pour normaliser et ainsi obtenir une densité de probabilité « valide » :




$f_i / \mathrm{len}_i$



# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

**Un peu de notation :**

$\mathcal{D}_{\mathcal{N}} := \{x_1, \ldots, x_N\} \in [m, m + l]$ , où $l$ et la longueur de l'intervalle considéré, en supposant qu'en dehors de $[m, m + l]$ la densité peut être assimilée à 0 (hypothèse de support)

- Nous avons divisé $[m, m + l]$ en un total de $b$ intervalles. La taille de chaque intervalle est donc $v := l/b$

Dans notre exemple:

- $N = 6$
- $m = 145\ cm$
- $l = 50\ cm$
- $b = 3 \Rightarrow v = \frac{50\ cm}{3} \approx 17cm$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

**Un peu de notation :**

$\mathcal{D}_{\mathcal{N}} := \{x_1, \ldots, x_N\} \in [m, m+l]$ , où $l$ et la longueur de l'intervalle considéré, en supposant qu'en dehors de $[m, m+l]$ la densité peut être assimilée à 0 (hypothèse de support)

- Nous avons divisé $[m, m+l]$ en un total de $b$ intervalles. La taille de chaque intervalle est donc $\nu := l/b$
- Pour chaque intervalle, nous avons procédé au comptage du nombre d'observations contenues :

$$\forall i = 1, \ldots, b, C_i := \sum_{j=1}^{N} \mathbb{I}_{[m+(i-1)\nu, m+i\nu]}(x_j)$$

$$\mathbb{I}_A(x) := \begin{cases} 1 \text{ si } x \in A \\ 0 \text{ autrement} \end{cases}$$

Dans notre exemple:

$C_1 = 1, C_2 = 2, C_3 = 3$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

**Un peu de notation :**

$\mathcal{D}_{\mathcal{N}} := \{x_1, \ldots, x_N\} \in [m, m + l]$, où $l$ et la longueur de l'intervalle considéré, en supposant qu'en dehors de $[m, m + l]$ la densité peut être assimilée à 0 (hypothèse de support)

- Nous avons divisé $[m, m + l]$ en un total de $b$ intervalles $\nu := l/b$. Nous appelons $\nu$ la fenêtre.
- Pour chaque intervalle, nous avons procédé au comptage du nombre d'observations contenues :

$$\forall i = 1, \ldots, b, C_i := \sum_{j=1}^{N} \mathbb{I}_{[m+(i-1)\nu, m+i\nu]}(x_j)$$

$$\mathbb{I}_A(x) := \begin{cases} 1 \text{ si } x \in A \\ 0 \text{ autrement} \end{cases}$$

- Pour chaque $x \in [m + (i - 1)\nu, m + i\nu]$ et pour chaque $i = 1, \ldots, b$, la densité estimée de $x$ est donnée par :

$$\hat{f}_b^{\text{Hist}}(x) := \frac{C_i}{N\nu}$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

$\hat{f}_b^{\mathrm{Hist}}$ est-elle une densité de probabilité ?

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

**EXERCICE.** Démontrer que :

1. $\forall x, \hat{f}_b^{\text{Hist}} \geq 0$
2. $\hat{f}_b^{\text{Hist}}$ est intégrable
3. $\int_{\text{support}} \hat{f}_b^{\text{Hist}}(x)dx = 1$

**SOLUTION 3.**

3

$$\int_{\text{support}} \hat{f}_b^{\text{Hist}}(x)dx = \int_m^{m+l} \hat{f}_b^{\text{Hist}}(x)dx$$

$$= \sum_{i=1}^{b} \int_{m+(i-1)\nu}^{m+i\nu} \frac{C_i}{N\nu} dx$$

$$= \frac{1}{N\nu} \sum_{i=1}^{b} C_i \nu = 1$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME

**Quels paramètre avons-nous du fixer ?**

- La valeur (ou coordonnée) $m$
- Le nombre total d'intervalles (ou boîtes) $b$
- La longueur (ou volume) de chaque intervalle/boîte $v$

Nous avons donc du fixer le support, et la granularité de recouvrement de l'espace.

Nous allons reprendre l'exemple vu précédemment, et voir empiriquement l'effet de ces choix. Nous allons aussi observer combien la taille de l'échantillon va jouer sur notre estimation.

- Télécharger le fichier TP1_Histogramme.ipynb : ibalelli.github.io → Teaching → Modélisation statistique avancée
- Ouvrir un terminal, aller dans le dossier où vous avez enregistré le fichier → jupyter notebook

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

Nous avons vu que une modification des paramètres $b$, le nombre de partitions, et $v = \frac{l}{b}$, la taille de chaque partition, peut avoir un effet important sur la qualité de notre estimation (tout comme la taille de l'échantillon, que par contre nous ne pouvons pas modifier a priori). Pouvons-nous optimiser ces deux paramètres ?

Nous allons tout d'abord évaluer la « qualité » de l'estimateur, et calculer son risque :

- Il faut définir une distance qui permette de caractériser l'écart entre $\hat{f}_b^{Hist}$ et $f$, e.g. la distance $\mathbb{L}^2$
- Il faut définir une fonction de perte, e.g. la fonction de perte quadratique ($\omega: u \mapsto u^2$)

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

Pour tout $x^*$ dans la $j$-ème boîte, nous pouvons estimer la dépendance par rapport à la fenêtre $\nu$ de l'estimateur au point $x^*$ comme la moyenne de l'erreur quadratique (ou **MSE**, de l'anglais *Mean Squared Error*) :

$$\mathrm{MSE}_f(x^*, \nu) = \mathbb{E}_f[(\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*) - f(x^*))^2]$$

Il est possible de décomposer le MSE en biais et variance :

$$\mathrm{MSE}_f(x^*, \nu) = (\underbrace{\mathbb{E}_f[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)] - f(x^*)}_{\textbf{Biais}})^2 + \underbrace{\mathrm{Var}[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)]_j}_{\textbf{Variance}}$$

Nous pouvons ensuite évaluer ces deux termes séparément. En particulier, soit $p_j$ la probabilité d'être dans la $j$-ème boîte après 1 tirage (dont l'estimation empirique est $\frac{C_j}{N}$), nous avons (astuce : se ramener à une loi de Bernoulli) :

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

Pour tout $x^*$ dans la $j$-ème boîte, nous pouvons estimer la dépendance par rapport à la fenêtre $\nu$ de l'estimateur au point $x^*$ comme la moyenne de l'erreur quadratique (ou **MSE**, de l'anglais *Mean Squared Error*) :

$$\mathrm{MSE}_f(x^*, \nu) = \mathbb{E}_f[(\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*) - f(x^*))^2]$$

Il est possible de décomposer le MSE en biais et variance :

$$\mathrm{MSE}_f(x^*, \nu) = (\underbrace{\mathbb{E}_f[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)] - f(x^*)}_{\textbf{Biais}})^2 + \underbrace{\mathrm{Var}[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)]_j}_{\textbf{Variance}}$$

Nous pouvons ensuite évaluer ces deux termes séparément. En particulier, soit $p_j$ la probabilité d'être dans la $j$-ème boîte après 1 tirage (dont l'estimation empirique est $\frac{C_j}{N}$), nous avons (astuce : se ramener à une loi de Bernoulli) :

$$\mathbb{E}_f[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)] = \frac{p_j}{\nu} \quad \text{et} \quad \mathrm{Var}_f[\hat{f}_\nu^{\mathrm{Hist}}(x^*)] = \frac{p_j(1-p_j)}{N\nu^2}$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

Nous souhaitons maintenant avoir une estimation globale du risque de $\hat{f}_b^{Hist}$, c'est pourquoi nous allons considérer l'intégrale du MSE sur l'intégralité du support → risque quadratique intégré (ou MISE, *Mean Integrated Squared Error*) :

$$\mathrm{MISE}_f(\nu) = \int_{\mathrm{support}} \mathrm{MSE}_f(x, \nu) dx$$

**EXERCICE.** En utilisant la dérivation vue précédemment, plus le fait que $\sum_j p_j = \int_{\mathrm{support}} f(x)dx = 1$ , dériver l'expression du risque quadratique intégré (en fonction de $f, p_j, N, \nu$)

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

**SOLUTION**

Nous avons d'une part :

I

$$\int_{\text{support}} \text{Var}_f[f_\nu^{Hist}(x)]dx = \frac{1}{N\nu}\left(1 - \sum_{j=1}^{b} p_j^2\right)$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

**SOLUTION**

Et d'autre part :

2

$$\int_{\text{support}} \left(\mathbb{E}_f[f_\nu^{Hist}(x)] - f(x)\right)^2 dx = \int_{\text{support}} f^2(x)dx - \frac{1}{\nu}\sum_{j=1}^{b} p_j^2$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

**SOLUTION**

Ce qui nous amène enfin au résultat suivant :

$$\mathrm{MISE}_f(\nu) = \int_{\mathrm{support}} f^2(x)dx + \frac{1}{N\nu} - \frac{N+1}{N\nu}\sum_{j=1}^{b} p_j^2$$

# ESTIMATEUR PAR HISTOGRAMME : RISQUE

**SOLUTION**

Ce qui nous amène enfin au résultat suivant :

$$\mathrm{MISE}_f(\nu) = \underbrace{\int_{\text{support}} f^2(x)dx}_{||f||_2^2} + \frac{1}{N\nu} - \frac{N+1}{N\nu}\sum_{j=1}^{b} p_j^2$$