

Київський національний університет імені Тараса Шевченка  
Кафедра теорії ймовірностей, статистики та актуарної математики

**Р. Майборода**

# **Непараметрична статистика**

Рекомендації по виконанню індивідуальних робіт

Київ — 2017

## Робота 1. Оцінювання функцій розподілу

### Частина 1. Оцінювання за кратною вибіркою

Нехай спостерігається вибірка  $X$  з незалежних, однаково розподілених випадкових величин  $X_1, \dots, X_n$  з невідомою функцією розподілу  $F$ . Для оцінки  $F$  за  $X$  можна використовувати емпіричну функцію розподілу

$$\hat{F}_n(x) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \mathbb{I}\{X_j < x\}.$$

$\hat{F}_n(x)$  є незміщеною оцінкою для  $F(x)$  з дисперсією

$$\sigma_{\hat{F}}^2(x) = \frac{1}{n} F(x)(1 - F(x)).$$

Оцінку  $\hat{\sigma}^2(x)$  для  $\sigma_{\hat{F}}^2(x)$  за вибіркою можна отримати, підставивши у цю формулу  $\hat{F}_n(x)$  замість справжньої  $F(x)$ .

Розподіли випадкових величин

$$(\hat{F}_n(x) - F(x)) / \sqrt{\hat{\sigma}^2(x)}$$

слабко збігаються до стандартного нормального розподілу при  $n \rightarrow \infty$ . Це можна використати для побудови асимптотичного довірчого інтервалу для  $F(x)$  при фіксованому  $x$ , аналогічно тому, як будуються асимптотичні довірчі інтервали для невідомих параметрів розподілу у параметричній статистиці (див. п. 8.5.1 в [4]).

#### Завдання першої частини роботи.

Реалізуйте обчислення емпіричної функції розподілу за вибіркою у вигляді функції мови R яка має специфікацію

`Femp(x, sample)`,

де

`x` — точка, в якій обчислюється емпірична функція розподілу,

`sample` — вибірка, по якій будується функція.

Значення функції `Femp(x, sample)` повинно дорівнювати значенню емпіричної функції розподілу у точці `x`.

(При написанні скрипту не використовуйте готові функції R для обчислення емпіричних функцій розподілу. Дозволяється застосовувати лише функції загального призначення.)

Перевірте роботу розробленої Вами функції на модельованих даних. Для цього візьміть з таблиці індивідуальних варіантів до цього завдання

розподіл  $F$ , що відповідає номеру Вашого варіанту. Для цього розподілу  $F$  згенеруйте кратні вибірки обсягу

$$n = 10, 50, 100, 500, 1000$$

спостережень. За кожною з цих вибірок підрахуйте емпіричну функцію розподілу на інтервалі від квантиля  $F$  рівня 0.01 до квантиля рівня 0.99. Для кожного обсягу вибірки нарисуйте на одному рисунку різними кольорами графіки емпіричної функції розподілу, підрахованої за вибіркою, і справжньої теоретичної функції розподілу  $F$ .

Порівняйте отримані графіки, зробіть висновки про те, чи підтверджують вони теорему Глівенко-Кантеллі.

Реалізуйте розрахунок меж довірчого інтервалу для функції розподілу у заданій точці у вигляді функції в R. Специфікація функції

`Fconf(x, sample, alpha)`,

де

`x` — довірчий інтервал будується для значення функції розподілу у цій точці,

`sample` — вибірка, по якій будується довірчий інтервал,

`alpha` — рівень значущості довірчого інтервалу.

Значенням функції `Fconf()` повинен бути вектор з двох елементів: нижньої і верхньої меж довірчого інтервалу.

3. Для розподілу  $F$ , обраного у завданні 1, точок  $\mathbf{x}$ , що дорівнюють квантилям рівня  $1/3$ ,  $1$  і  $2/3$  для розподілу  $F$  і обсягів вибірки

$$n = 10, 50, 100, 500, 1000$$

виконайте наступну роботу.

Для кожного варіанту  $n$  згенеруйте  $m = 10000$  псевдовипадкових вибірок обсягу  $n$ . По кожній вибірці знайдіть довірчий інтервал для значення функції розподілу у точці  $\mathbf{x}$  з рівнем значущості  $\alpha$ . Підрахуйте відносну частоту попадання справжнього значення функції розподілу у отримані довірчі інтервали. Отримані частоти запишіть у таблицьку, в якій кожен рядочок відповідає одному значенню  $n$ , а кожен стовпчик — одному зі значень  $\mathbf{x}$ .

Зробіть висновок про акуратність побудованих Вами довірчих інтервалів і доцільність їх використання при різних обсягах вибірки.

**Індивідуальні варіанти функції розподілу  $F$ :**

(1)  $F \sim N(1, 1)$ ,

- (2)  $F \sim \chi^2(3)$ ,
- (3)  $F$  — симетричний трикутний розподіл на  $[0,2]$ ,
- (4)  $F \sim \text{Exp}_{\lambda=1}$ ,
- (5)  $F \sim \chi^2(4)$ ,
- (6)  $F$  — Т-Ст'юдента з 6-ма ступенями вільності,
- (7)  $F$  — бета-розподіл з параметрами  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 3$ ,
- (8)  $F$  — розподіл Лапласа з середнім 0 та інтенсивністю 1,
- (9)  $F \sim \text{Exp}_{\lambda=0.5}$ ,
- (10)  $F$  — рівномірний розподіл на  $[0,1]$ .

## Частина 2. Оцінювання функцій розподілу за цензурованою вибіркою.

Розглядається модель спостережень з випадковим цензуруванням з права. У цій моделі вважається, що для кожного ( $j$ -того,  $j = 1, \dots, n$ ) спостереження існує змінна, яка досліджується  $Z_j$ , та момент цензурування  $Y_j$ . Ці змінні не спостерігаються окремо. Спостереження складаються з  $X_j = \min(Z_j, Y_j)$ , (відцензуровані спостереження) та  $\delta_j = \mathbb{I}\{Z_j < Y_j\}$  (індикатори відсутності цензурування).

У стандартній теорії вважається, що  $Z_j, Y_j, j = 1, \dots, n$  — незалежні в сукупності невід’ємні випадкові величини,  $Z_j$  має функцію розподілу  $F$ ,  $Y_j$  — функцію розподілу  $G$ .

Задача полягає в оцінці функції розподілу змінної, що досліджується —  $F$ .

Оцінку Каплана-Мейера можна використовувати і тоді, коли розподіл цензора невідомий. Для її підрахунку впорядкуємо спостереження у порядку зростання  $X_j - (X_{[1]}, \tilde{\delta}_1), (X_{[2]}, \tilde{\delta}_1), \dots, (X_{[n]}, \tilde{\delta}_1)$ . (Тобто  $X_{[1]} < X_{[2]} < \dots < X_{[n]}$ ,  $\tilde{\delta}_j$  — це  $\delta_j$ , переставлені “разом з  $X_j$ ”).

Тоді

$$\hat{F}^{KM}(x) = 1 - \prod_{X_{[i]} \leq x} \left( 1 - \frac{\tilde{\delta}_i}{n - i + 1} \right)$$

(формула правильна лише для випадку, коли у вибірці немає однакових значень  $X_j$ ).

Оцінка Каплана-Мейера є асимптотично нормальною з асимптотичною дисперсією у точці  $x$ :

$$s_n^2(x, F) = (1 - F(x))^2 \sum_{j=1}^n \frac{\tilde{\delta}_j \mathbb{I}\{X_{[j]} \leq x\}}{(n + 1 - j)(n + 1 - j - \tilde{\delta}_j)}$$

(формула Грінвуда). Таким чином, випадкова величина

$$(\hat{F}_n^{KM}(x_0) - F(x_0))/s_n(x_0, \hat{F}_n^{KM})$$

має приблизно стандартний нормальний розподіл. Це можна використати для побудови (асимптотичного) довірчого інтервалу для невідомих значень  $F(x_0)$ .

Для побудови довірчих інтервалів можна також використовувати монотонні перетворення від оцінок. Нехай, наприклад,  $g(t)$  — деяка неперервно диференційовна функція від  $t$ .

Розглянемо

$$\sqrt{n}(g(\hat{F}_n^{KM}(x_0)) - g(F(x_0))) \approx g'(F(x_0))\sqrt{n}(\hat{F}_n^{KM}(x_0) - F(x_0))$$

( $g'(t)$  — похідна  $g(t)$  по  $t$ ).

Отже, якщо  $\sqrt{n}(\hat{F}_n^{KM}(x_0) - F(x_0))$  слабо збігається до нормального розподілу  $N(0, \sigma^2)$ , то

$$\sqrt{n}(g(\hat{F}_n^{KM}(x_0)) - g(F(x_0)))$$

слабо збігається до  $N(0, (g'(F(x_0)))^2 \sigma^2)$ . (див. [1], теорема 3 п.5 розділ 1).

Більш загальні формули, які можна застосовувати і у випадку, коли вибірка містить однакові значення, можна знайти у [2].

#### **Завдання другої частини роботи.**

Реалізуйте оцінку Каплана-Мейера у вигляді функції R. Функція повинна мати специфікацію

`FKM(x, sample, delta)`,

де

`x` — точка, в якій оцінюється невідома функція розподілу;

`sample` — набір спостережуваних значень;

`delta` — набір індикаторів того, що цензурування не відбулось (тобто відповідний елемент `sample` є значенням досліджуваної величини, а не цензора).

Значенням функції `FKM(x, sample, delta)` повинно бути значення оцінки Каплана-Мейера для функції розподілу у точці `x`, підрахованої за даними `sample, delta`.

За допомогою генераторів псевдовипадкових чисел згенеруйте цензуровану вибірку з розподілами досліджуваної величини  $F$  і цензора  $G$ , вибраними з таблиці 1 відповідно до Вашого варіанту. Генерацію проведіть для обсягів вибірки

$$n = 10, 50, 100, 500, 1000$$

По кожній з вибірок побудуйте графік відповідної оцінки Каплана-Мейера для функції розподілу  $F$  разом з графіком справжньої теоретичної функції розподілу  $F$ .

Для кожного обсягу

$$n = 10, 50, 100, 500, 1000$$

Варіант	$F$	$G$
1	$F \sim \chi^2(3)$	$G \sim \text{Exp}_{\lambda=1/3}$
2	$F \sim \text{Exp}_{\lambda=1}$	$G \sim \text{Exp}_{\lambda=1/2}$
3	$F$ — симетричний трикутний на $[0,2]$	$G$ рівномірний на $[0,2]$
4	$F$ — логнормальний $\sim \exp(\xi)$ , $\xi \sim N(0, 1)$	$G \sim \chi^2(3)$
5	$F$ — півнормальний $\sim  \xi $ , $\xi \sim N(0, 1)$	$G \sim \chi^2(2)$
6	$F \sim \text{Exp}_{\lambda=1/3}$	$G \sim \chi^2(3)$
7	$F \sim \text{Exp}_{\lambda=1/2}$	$G \sim \text{Exp}_{\lambda=1}$
8	$F$ рівномірний на $[0,2]$	$G$ — симетричний трикутний на $[0,2]$
9	$F \sim \chi^2(3)$	$G$ — логнормальний $\sim \exp(\xi)$ , $\xi \sim N(0, 1)$
10	$F \sim \chi^2(2)$	$G$ — півнормальний $\sim  \xi $ , $\xi \sim N(0, 1)$

Таблиця 1: Розподіли для цензурованої вибірки

згенеруйте по  $m = 1000$  цензурованих вибірок з розподілом, що відповідає Вашому варіанту. По кожній вибірці оцініть функцію розподілу  $F(x)$  в точці  $x$ , що дорівнює квантилю рівня  $1/2$  для розподілу  $F$ . Таким чином, отримаєте вибірки з оцінок, по  $m$  спостережень у кожній вибірці, що відповідає певному фіксованому значенню  $n$ .

Побудуйте гістограми по кожній з цих вибірок з оцінок і відобразіть на них нормовану щільність нормального розподілу з відповідними параметрами (див. п. 7.1 в [4]). Оцініть на око, для даних якого обсягу  $n$  розподіл оцінок Каплана-Мейера добре описується нормальним наближенням.

Прологарифмуйте всі елементи всіх вибірок з оцінок і побудуйте відповідні гістограми для прологарифмованих вибірок. Наскільки добре описує нормальне наближення розподіл логарифму оцінки Каплана-Мейера?

Використайте псевдовипадкові дані, згенеровані у попередньому завданні, для перевірки точності довірчих інтервалів.

Для цього, при фіксованому  $n$  ( $n = 10, 50, 100, 500, 1000$ ) по кожній з  $m$  цензурованих вибірок побудуйте довірчі інтервали для  $F(x)$  (як і раніше,  $x$  — квантиль рівня  $1/2$  для розподілу  $F$ ) двома способами:

- (1) використовуючи асимптотичну нормальність оцінок Каплана-Мейера,
- (2) використовуючи асимптотичну нормальність логарифмів від оцінок Каплана-Мейера.

Для інтервалів кожного типу підрахуйте відносну частоту випадків, коли ці інтервали покривали справжнє значення  $F(x)$ .

Зробіть висновок, інтервали якого типу - (1) чи (2) виявились більш точними у Вашому випадку.



## Робота 2. Статистика зміщених вибірок

### Частина 1. Оцінка функції розподілу за зміщеною вибіркою

Вибіркова процедура зветься зміщеною (biased sampling), якщо для всіх об'єктів з генеральної сукупності ймовірність потрапити до вибірки залежить від значення досліджуваної характеристики. Позначимо об'єкт літерою  $O$ , а його досліджувану характеристику —  $\xi(O)$ . Тоді

$$P\{O \text{ потрапить до вибірки} \mid \xi(O) = t\} = cw(t),$$

де  $c$  — невідома константа,  $w(t)$  — відома зміщуюча функція.

Нехай  $F$  — функція розподілу  $\xi(O)$  у генеральній сукупності. У лабораторній роботі розглядається випадок, коли оцінювання  $F$  потрібно провести за двома вибірками:

(1) незміщена вибірка, до якої всі об'єкти потрапляють з однаковими ймовірностями;

(2) зміщена вибірка із заданою зміщуючою функцією  $w$ .

За незміщеною вибіркою  $\xi_1, \dots, \xi_{n_1}$   $F$  можна оцінити, використовуючи звичайну емпіричну функцію розподілу:

$$\hat{F}_{emp}(x) = \frac{1}{n_1} \sum_{j=1}^{n_1} \mathbb{I}\{\xi_j < x\}$$

За зміщеною вибіркою  $\eta_1, \dots, \eta_{n_2}$  можна оцінити  $F$  використовуючи оцінку Горвіца-Томпсона (Horwitz-Thompson, див. [6], с. 199):

$$\hat{F}_{HT}(x) = \frac{\sum_{j=1}^{n_2} \frac{\mathbb{I}\{\eta_j < x\}}{w(\eta_j)}}{\sum_{j=1}^{n_2} \frac{1}{w(\eta_j)}}$$

За двома вибірками разом можна побудувати оцінку двома способами:

(а) Як лінійну комбінацію оцінок по зміщеній та незміщеній вибірках:

$$\hat{F}_{mix}(x) = \frac{1}{2}(\hat{F}_{emp}(x) + \hat{F}_{HT}(x))$$

(можна брати також лінійну комбінацію з ваговими коефіцієнтами не рівними  $1/2$ , а обраними з міркувань мінімізації дисперсії отриманої оцінки. Розробка відповідної теорії та реалізація алгоритму можуть бути хорошим додатковим завданням для тих, хто достроково виконає основну частину завдання роботи).

(б) за допомогою емпіричного методу найбільшої вірогідності, який приводить до оцінки Варді (Vardi, див. [6], с. 328):

$$\hat{F}_V(x) = \sum_{j=1}^{n_1+n_2} p_j \mathbb{I}\{\zeta_j < x\},$$

де  $\zeta_1, \dots, \zeta_{n_1+n_2}$  — об'єднання незміщеної та зміщеної вибірок,

$$p_j = \frac{W}{\lambda + n_2 w(\zeta_j)},$$

$$W = \left( \sum_{j=1}^{n_1+n_2} \frac{1}{\lambda + n_2 w(\zeta_j)} \right)^{-1},$$

Число  $\lambda$  знаходиться як додатній корінь рівняння

$$\sum_{j=1}^{n_1+n_2} \frac{w(\zeta_j)}{\lambda + n_2 w(\zeta_j)} = 1$$

### Завдання першої частини роботи:

Для заданих функції розподілу  $F$  та зміщуючої функції  $w$  згенерувати незміщену вибірку обсягу  $n_1 = 300$  та зміщену вибірку обсягу  $n_2 = 300$ , побудувати за ними чотири перелічені вище оцінки для  $F$  і вивести їх графіки разом із справжньою функцією  $F$ . Зробити попередні висновки щодо того, яка оцінка точніша (на око).

**Частина 2. Оцінювання параметрів та характеристика якості оцінок функції розподілу** Всі оцінки, описані вище, можна зобразити у вигляді

$$\hat{F}_k(x) = \sum_{j=1}^{n_1+n_2} p_j^{(k)} \mathbb{I}\{\zeta_j < x\},$$

де  $k$  — тип оцінки (емпірична функція розподілу, оцінка Горвіца-Томпсона, лінійна комбінація, оцінка Варді),  $p_j^{(k)}$  — вагові коефіцієнти для оцінки  $k$ -того типу. Використовуючи ці оцінки для функції розподілу  $F$ , можна оцінювати різні функціонали від  $F$ . Наприклад, якщо потрібно оцінити

функціональний момент,  $\bar{g} = \mathbb{E} g(\xi_j) = \int g(x)F(dx)$ , то відповідна оцінка може бути навантаженим емпіричним моментом:

$$\hat{g}^{(k)} = \int g(x)\hat{F}_k(dx) = \sum_{j=1}^{n_1+n_2} p_j^{(k)} g(\zeta_j).$$

Так можна оцінювати математичне сподівання та дисперсію розподілу  $F$ .

Для оцінки квантилів (випадок неперервної, строго зростаючої  $F$ ):  $Q^F(\alpha) = F^{-1}(\alpha) = \sup\{t : F(t) < \alpha\}$  можна використовувати навантажені емпіричні квантилі:

$$\hat{Q}^{(k)}(\alpha) = \sup\{t : \hat{F}_k(t) < \alpha\}.$$

Так можна оцінювати медіани та інтерквартильний розмах.

Для характеристики якості оцінки  $\hat{F}(x)$  для  $F$ , можна використати рівномірну відстань:

$$d_\infty(\hat{F}, F) = \sup_{t \in \mathbb{R}} |\hat{F}(t) - F(t)|,$$

$L_q$  — відстань:

$$d_q(\hat{F}, F) = \left( \int |\hat{F}(t) - F(t)|^q F(dt) \right)^{1/q}.$$

### Завдання другої частини роботи:

(а) Розробити алгоритми оцінки для заданого функціоналу (варіанти: математичного сподівання, дисперсії, медіани, інтерквартильного розмаху) на основі всіх чотирьох видів оцінки функції розподілу, отриманих у першій частині роботи. Ці алгоритми реалізувати у вигляді функцій R. Порівняти якість отриманих оцінок на модельованих вибірках, використовуючи такі характеристики якості оцінок, як зміщення, дисперсія, інтерквартильний розмах.

або

(б) На модельованих вибірках підрахувати одну з відстаней  $d_\infty$ ,  $d_1$  або  $d_2$  між оцінкою та оцінюваною функцією розподілу і порівняти середні відстані для чотирьох типів оцінок.

Конкретні умови другої частини роботи отримати у викладача.

**Індивідуальні варіанти функції розподілу та зміщуючої функції:**

- (1)  $F \sim N(1, 1)$ ,  $w(t) = 1/(1 + \exp(t - 1))$ ,
- (2)  $F \sim \chi^2(3)$ ,  $w(t) = 1/(t + 1)$ ,
- (3)  $F$  — трикутний розподіл на  $[0, 2]$ ,  $w(t) = 1 - t/2$ ,
- (4)  $F \sim \text{Exp}_{\lambda=1}$ ,  $w(t) = (1 + \cos(t))/2$ ,
- (5)  $F \sim \chi^2(4)$ ,  $w(t) = 1 - 0.5/(1 + x)$ ,
- (6)  $F$  — Т-Стюдента з 6-ма ступенями вільності,  $w(t) = 1/(1 + \exp(t - 1))$ ,
- (7)  $F$  — бета-розподіл з параметрами  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 3$ ,  $w(t) = \cos(t)$ .
- (8)  $F$  — розподіл Лапласа з середнім 0 та інтенсивністю 1,  $w(t) = 1 - 0.5 * \exp(-t^2)$ ,
- (9)  $F \sim \text{Exp}_{\lambda=0.5}$ ,  $w(t) = 1/(t + 1)$ ,
- (10)  $F$  — рівномірний розподіл на  $[0, 1]$ ,  $w(t) = 1 - t^2$ .

### Робота 3. Вибір оптимального параметра згладжування

Спостерігається вибірка з незалежних, однаково розподілених випадкових величин  $X_1, \dots, X_n$ ,  $f$  — невідома щільність розподілу  $X_i$ . Задача полягає в оцінці  $f$ .

Ядерна оцінка щільності має вигляд:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{hn} \sum_{j=1}^n K\left(\frac{x - X_j}{h}\right),$$

де  $K$  — ядро, тобто щільність деякого ймовірнісного розподілу,  $h$  — параметр згладжування, який потрібно обирати, виходячи з мінімізації деякого функціоналу якості оцінки.

Типовий функціонал якості — проінтегрована середньоквадратична похибка (mean integrated squared error, MISE):

$$\text{MISE}(h) = \mathbb{E} \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{f}(x) - f(x))^2 dx.$$

Нехай виконуються наступні умови:

$f$  — двічі неперервно диференційовна функція і  $\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} (f''(x))^2 dx < \infty$ ,

$$d^2 = \int K^2(x) dx < \infty, \int xK(x) dx = 0, D = \int x^2 K(x) dx < \infty.$$

Тоді головна частина MISE ( $n \rightarrow \infty$ ) мінімізується при

$$h = h_{opt} = \left( \frac{d^2}{ND^2\varphi} \right)^{1/5}$$

Оскільки  $\varphi$  невідоме, його на практиці заміняють оцінкою за спостереженнями. Є два адаптивні підходи до побудови таких оцінок:

1. Параметричний. Вважаємо, що  $f$  близька до деякої щільності, котру можна задати параметрично, скажімо,  $f(x, \vartheta)$ . Знаходимо  $\varphi(\vartheta) = \int_{-\infty}^{\infty} (f''(x, \vartheta))^2 dx < \infty$ . Оцінюємо  $\vartheta$  за спостереженнями деякою оцінкою  $\hat{\vartheta}$ . Підставляємо  $\varphi(\hat{\vartheta})$  замість справжнього  $\varphi$  у формулу для  $h_{opt}$  і отримуємо оцінку  $\hat{h}_{opt}$ , котру і використовуємо як параметр згладжування у ядерній оцінці щільності.

Якщо вибрати на роль наближеної параметричної моделі гауссову щільність, приходимо до правила Сілвермана:

$$h_{silv} = \left( \frac{d^2 8\sqrt{\pi}}{3ND^2} \right)^{1/5} \hat{S},$$

де  $S$  — деяка оцінка середньоквадратичного відхилення нормального розподілу за даними  $X_1, \dots, X_n$ . Так, при

$$\hat{S} = S_0 = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (X_j - \bar{X})^2}$$

— отримуємо просте правило Сілвермана, а при

$$\hat{S} = \min(S_0, \text{IR}/1.34)$$

— полішене правило Сілвермана (IR — інтерквартильний розмах).

2. Непараметричний. На першому кроці оцінюємо  $f$  деякою піотною непараметричною оцінкою  $\tilde{F}$  (це може бути ядерна оцінка з параметром згладжування, обраним за правилом Сілвермана). Оцінюємо  $\varphi$  за допомогою  $\hat{\varphi} = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{f}''(x))^2 dx$ . Цю оцінку підставляємо у формулу для оптимального параметра згладжування і отримуємо

$$h_{np} = \left( \frac{d^2}{ND^2\hat{\varphi}} \right)^{1/5}.$$

З цим параметром згладжування рахуємо остаточну ядерну оцінку.

Інший можливий підхід до вибору параметра згладжування полягає у використанні техніки крос-валідації. Про це можна прочитати у книжці [7] п. 6.1.

**Завдання роботи.** Згенерувати вибірку з заданим розподілом і побудувати ядерну оцінку щільності використовуючи параметр згладжування

- обраний за правилом Сілвермана (простим і полішеним)
- обраний з використанням непараметричної оцінки  $\varphi$
- обраний крос-валідацією.

Намалювати графіки отриманих оцінок разом із оцінюваною функцією щільності. Спробувати вручну підібрати параметр згладжування на око, так, щоб оцінка найточніше відповідала оцінюваній функції. Вивести також графік ядерної оцінки з теоретично оптимальним  $h = h_{opt}$ . Експеримент повторити з кількома вибірками з одним і тим же розподілом.

Спробувати зробити висновки по таких питаннях:

- чи є  $h_{opt}$  дійсно оптимальним значенням параметра згладжування, чи вдається знайти краще вибором на око?

— наскільки відрізняється від оптимального  $h$  обране за правилом Сілвермана? Чи доцільно його використовувати, якщо оцінювана щільність подібна до розглядуваної у Вашому варіанті?

— наскільки непараметрична адаптація поліпшує оцінку порівняно з правилом Сілвермана? Чи варто застосовувати її?

— Чи можна вважати, що метод крос-валідації дає оцінки, близькі до оптимальних?

**Зауваження.** Варіанти відрізняються ядрами оцінок  $K$  та щільностями  $f$ , які треба оцінити. У різних варіантах висновки щодо застосовності тих чи інших методів можуть бути різними.

Всі порівняння достатньо робити на око, але, за бажанням, можна порівнювати значення  $L_2$  відстаней між оцінкою та оцінюваною функцією, усереднені по  $\sim 100$  вибірках. (Це емпіричний аналог MISE).

**Значення параметрів для індивідуальних завдань**

(1)  $f \sim N(1, 1)$ ,  $K$  — трикутне ядро.

(2)  $f \sim \chi^2(3)$ ,  $K$  — ядро Єпанечнікова.

(3)  $f$  — розподіл Лапласа з мат. сподіванням 0,  $\lambda = 1$ ,  $K$  — гауссове ядро.

(4)  $f$  — суміш розподілів  $N(-1, 1)$ ,  $N(1, 1)$  з ймовірністю змішування  $p = 1/2$ ,  $K$  — ядро Єпанечнікова.

(5)  $f$  — симетрична трикутна щільність на  $[-1, 1]$ ,  $K$  — ядро Єпанечнікова.

(6)  $f$  — щільність бета-розподілу з  $a = 2$ ,  $b = 4$ ,  $K$  — гауссове ядро.

(7)  $f$  — щільність розподілу Фішера  $F(4, 10)$ ,  $K$  — гауссове ядро.

(8)  $f$  — щільність розподілу Стюдента  $T(5)$ ,  $K$  — ядро Єпанечнікова.

(9)  $f$  — півнормальна щільність з  $\sigma = 1$ ,  $K$  — трикутне ядро.

(10)  $f$  — щільність гамма-розподілу,  $\alpha = 2$ ,  $\lambda = 1$ ,  $K$  — гауссове ядро.

#### Робота 4. Емпірично-баєсова класифікація

У роботі потрібно побудувати емпірично-баєсів класифікатор на основі навчаючої вибірки з реальних даних. При цьому використовуються два підходи: (I) класифікація у якій використовується ядерна оцінка багатовимірної щільності та (II) класифікація на основі проекції багатовимірних даних на деякий напрямок, обраний з метою мінімізації ймовірності похибки.

##### 1. Баєсова класифікація.

Нехай спостережувані об'єкти  $O$  можуть належати одному з  $M$  класів (популяцій)  $\mathcal{P}_1, \dots, \mathcal{P}_M$ . Номер популяції, якій належить об'єкт  $O$  позначимо  $\text{ind}(O)$ . У кожного об'єкта спостерігається (можливо, багатовимірна) характеристика  $\xi(O)$ , яка є випадковою величиною (вектором). Простір можливих значень  $\xi(O)$  позначимо  $\mathcal{X}$ .

Задача класифікації полягає в тому, щоб за спостережуваною характеристикою  $\xi(O)$  визначити, до якої популяції належить об'єкт, тобто, вказати  $\text{ind}(O)$ . Класифікатор це функція  $g : \mathcal{X} \rightarrow \{1, \dots, M\}$ , яка можливим спостережуваним значенням  $x$  ставить у відповідність  $g(x)$  — номер популяції, котрій, як ми сподіваємось, повинен належати об'єкт  $O$  з характеристикою  $\xi(O) = x$ .

При баєсовому підході якість класифікатора характеризують ймовірністю його помилки. Тобто, ми вважаємо, що існують ймовірності

$$\pi_k = \mathbb{P}\{\text{ind}(O) = k\}$$

(апріорна ймовірність того, що об'єкт належить  $k$ -тій популяції, та розподіли спостережуваних характеристик, за умови, що об'єкт належить  $k$ -тій популяції:

$$F^{(k)}(A) = \mathbb{P}\{\xi(O) \in A \mid \text{ind}(O) = k\}.$$

Виберемо міру  $\mu$ , відносно якої всі розподіли  $F^{(k)}$  мають щільності  $f^{(k)}$ :

$$F^{(k)}(A) = \int_A f^{(k)}(x) \mu(dx),$$

(у цій роботі  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ ,  $\mu$  завжди міра Лебега, тобто  $f^{(k)}$  — звичайні щільності  $d$ -вимірних розподілів). Тоді ймовірність помилки класифікатора  $g$

$$L(g) = \mathbb{P}\{g(\xi(O)) \neq \text{ind}(O)\} = 1 - \int p_{g(x)} f^{g(x)}(x) \mu(dx).$$



Класифікатор з найменшою ймовірністю помилки називають баєсовим класифікатором. Легко бачити, що, якщо не накладати на функцію  $g$  додаткових обмежень, то

$$g^B(x) = \operatorname{argmax}_{m=1,\dots,M} p_m f^{(m)}(x)$$

— баєсів класифікатор. Ймовірність його помилки —

$$L(g^B) = 1 - \int \max_{m=1,\dots,M} p_m f^{(m)}(x) \mu(dx)$$

Якщо  $f^{(k)}$  і/або  $p_k$  невідомі, їх можна оцінити за навчаючою вибіркою, тобто за набором  $\Xi_n = \{(\xi(O_1), \operatorname{ind}(O_1)), \dots, (\xi(O_n), \operatorname{ind}(O_n))\}$ , де  $O_j$  — набір об'єктів, для яких нам відома їх справжня класифікація. Якщо оцінки підставити у формулу для баєсового класифікатора замість справжніх значень, отримуємо емпірично-баєсів класифікатор.

2. Два підходи до багатовимірної класифікації.

(I) Оцінюємо щільності розподілу  $f^{(k)}$  за допомогою ядерних оцінок, наприклад:

$$\hat{f}^{(m)}(x) = \frac{1}{n_m h_1 h_2 \dots h_d} \sum_{j: i_j=m} \prod_{k=1}^d K\left(\frac{x^k - \xi_j^k}{h_k}\right),$$

де

$n_m$  — кількість об'єктів  $m$ -того класу у навчаючій вибірці;

$h_k$  — параметр згладжування для  $k$ -тої координати;

$x = (x^1, \dots, x^d)$ ,  $\xi_j = \xi(O_j) = (\xi_j^1, \dots, \xi_j^d)$ ;

$i_j = \operatorname{ind}(O_j)$ ;

$K$  — одновимірне ядро (наприклад, Єпанечнікова).

Тепер, якщо апріорні ймовірності відомі, підставляємо оцінки у формулу для баєсового класифікатора і отримуємо:

$$\hat{g}(x) = \operatorname{argmax}_{m=1,\dots,M} p_m \hat{f}^{(m)}(x)$$

— безпосередній емпірично-баєсів класифікатор.

(II) Для побудови класифікатора вибираємо деякий напрямок у  $\mathbb{R}^d$  —  $u = (u^1, \dots, u^d)$ ,  $\|u\| = 1$  і робимо проекцію  $\xi(O) = (\xi^1, \dots, \xi^d)$  на  $u$ :  $\eta^u = \eta^u(O) = \sum_{k=1}^d u^k \xi^k$ . Це — одновимірна характеристика  $O$ , за якою можна будувати класифікатори так само, як за багатовимірними, тільки

тепер оцінювати треба буде одновимірні щільності розподілу звичайними ядерними оцінками щільності  $\hat{f}_u^{(m)}$ , побудованими за навчаючою вибіркою  $\{(\eta_1^u, \text{ind}(O_1)), \dots, (\eta_n^u, \text{ind}(O_n))\}$ .

Питання полягає в тому, як найкраще вибрати напрямок проектування —  $u$ ? Це можна зробити, використовуючи оцінену ймовірність помилки баєсового класифікатора, побудованого за проекцією на напрямок  $u$ :

$$\hat{L}(u) = 1 - \int \max_{m=1, \dots, M} p_m \hat{f}_u^{(m)}(x) \mu(dx).$$

Напрямок  $u$  потрібно обрати так, щоб мінімізувати цю величину.

### **Завдання роботи.**

У файлі `vin0.xls` містяться дані про вміст певних хімічних речовин у пробах вина з трьох виноградників. Кожен рядочок відповідає одній пробі, у стовпчику `Site` — номер виноградника, на якому було вироблене вино, далі у кожному стовпчику відповідна характеристика вина.

Потрібно побудувати класифікатор, який за двома заданими характеристиками (наприклад, "Alcogol" та "phenols") визначатиме, на якому винограднику вироблено дане вино. Класифікатори будуються двома способами, описаними вище. Побудувавши класифікатори потрібно підрахувати частоту їх помилок на навчаючій вибірці та зробити висновок, який з класифікаторів варто рекомендувати. Бажано також зобразити рисунки, які показують роботу класифікаторів.

Різні варіанти відрізняються різними обраними парами спостережуваних характеристик. (Для різних таких пар висновки щодо вибору класифікатора можуть бути різними).

За бажанням, студенти можуть виконувати цю роботу на власних даних, або на даних, отриманих з інтернета, якщо результати будуть цікавими.

### **Пари характеристик для індивідуальної роботи**

- (1) alcogol, phenols.
- (2) ash, phenols.
- (3) alcohol, magnesium.
- (4) Proanthocyanins, magnesium.
- (5) Flavanoids, "Alcalinity of ash".
- (6) "phenols "Malic acid".
- (7) NF, Flavanoids.
- (8) phenols, "Hue".
- (9) "Magnesium OD.

(10) "Proanthocyanins phenols.

### Робота 5. Непараметрична регресія

У роботі спочатку генеруються дані, що складаються з пар чисел  $(X_j, Y_j)$ , які пов'язані регресійною залежністю:

$$Y_j = g(X_j) + \varepsilon_j, j = 1, \dots, n$$

де  $g$  — задана функція регресії,  $\varepsilon_j$  — випадкова похибка регресії. Функція регресії вважається невідомою, її треба оцінити за даними. Для оцінювання використовуються: ковзаюче середнє, ковзаюча медіана, оцінка Надарая-Ватсона, локально-лінійна оцінка та проєкційні оцінки із заданими базисними функціями. Потрібно реалізувати ці оцінки у вигляді функцій R та вивести їх графіки разом з даними для порівняння. Висновки про поведінку оцінок можна робити за цими графіками “на око”.

Бажано подивитись, як змінюються оцінки при зміні допоміжних параметрів — таких, як ширина вікна, параметр згладжування, вимірність простору проєкції.

Добре також ввести у вибірку викид і подивитись, як відреагують на нього різні оцінки.

**Ковзаюче середнє.** (Sliding window, sliding mean estimate). Задаємо значення параметра  $h$  — ширина вікна. Для того, щоб оцінити  $g(x)$  у точці  $x_0$ , виділяємо з усіх даних підвибірку, яка складається з тих  $Y_j$ , для яких  $X_j$  потрапляє у “вікно” ширини  $h$  навколо  $x_0$ :

$$\mathbf{Y}(x_0, h) = \{Y_j : |X_j - x_0| < \frac{h}{2}\}$$

Оцінка

$$\hat{g}_{sw}(x_0) = \text{Mean}[\mathbf{Y}(x_0, h)] = \frac{\sum_{j=1}^n Y_j \mathbb{1}\{|X_j - x_0| < h/2\}}{\sum_{j=1}^n \mathbb{1}\{|X_j - x_0| < h/2\}}.$$

**Ковзаюча медіана.** (Sliding median). Оцінка визначається як медіана  $Y_j$  для всіх спостережень, що потрапили до ковзаючого вікна:

$$\hat{g}_{SMed}(x_0) = \text{Median}[\mathbf{Y}(x_0, h)]$$

Якщо похибки гауссові, то ковзаюча медіана більш розкидана ніж ковзаюче середнє при тій же ширині вікна. Але, за наявності викидів, ковзаюча медіана виявляється більш стійкою до них, ніж ковзаюче середнє, яке

має тенденцію “притягатись” до викидів (так само, як оцінки Надарая-Ватсона).

**Оцінка Надарая-Ватсона.** (Nadaraya Watson regression). Оцінка Надарая-Ватсона з ядром  $K$  та параметром згладжування  $h$  визначається як

$$\hat{g}_{NW}(x_0) = \frac{\sum_{j=1}^n Y_j K((X_j - x_0)/h)}{\sum_{j=1}^n K((X_j - x_0)/h)}.$$

Оцінка ковзаючого вікна — це оцінка Надарая-Ватсона з прямокутним вікном  $K(x) = \mathbb{I}\{|x| < 1/2\}$ .

### Проекційна оцінка функції регресії

Нехай  $p_1, \dots, p_m$  — набір “базисних” функцій (в принципі, це можуть бути будь-які функції, але хороші оцінки будуть, якщо справжню функцію регресії можна добре наблизити лінійною комбінацією цих функцій). Розглянемо оцінку для  $g$  вигляду

$$\hat{g}_{pr}(x) = \sum_{i=1}^m \hat{b}_i p_i(x)$$

де коефіцієнти  $\hat{b}_i$  визначають як точку мінімуму функціоналу найменших квадратів:

$$J(b) = \sum_{j=1}^n \left( Y_j - \sum_{i=1}^m b_i p_i(X_j) \right)^2$$

Позначимо  $\mathbf{X} = (p_i(X_j))_{j=1; i=1}^{n; m}$ ,  $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^T$ ,  $\hat{\mathbf{b}} = (\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_m)^T$ . Тоді

$$\hat{\mathbf{b}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}.$$

### Локально-лінійна та локально-проекційна оцінка

Недолік проекційних оцінок — вони реагують на порушення гладкості оцінюваної функції “нелокально”, тобто погіршуються не тільки там де є розрив, а і на тих інтервалах, де справжня функція регресії є гладенькою. Недолік оцінок Надарая-Ватсона (та оцінок, що використовують ковзаюче вікно) — неадекватна поведінка на кінцях інтервалу зміни регресора. Комбінація цих двох підходів — локально-проекційні оцінки.

Нехай  $p_1, \dots, p_m$  — набір “базисних” функцій,  $K$  — ядро,  $h$  — параметр згладжування. Для того, щоб оцінити  $g(x_0)$  шукають такі коефіцієнти

$\hat{b}_i(x_0)$ , які мінімізують навантажений функціонал найменших квадратів:

$$J(b) = \sum_{j=1}^n K((x_0 - X_j)/h) \left( Y_j - \sum_{i=1}^m b_i(x_0) p_i(X_j) \right)^2.$$

Можна показати, що

$$\mathbf{b}(\hat{x}_0) = (\mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{W} \mathbf{Y},$$

де  $\mathbf{W}$  — діагональна матриця вагових коефіцієнтів  $\text{diag}(K((x_0 - X_1)/h), \dots, K((x_0 - X_n)/h))$ .

Локально-лінійна регресія відповідає вибору двох базисних функцій:  
 $p_1(x) = 1$ ,  $p_2(x) = x$ .

#### **Індивідуальні завдання роботи.**

У завданні вказано розподіл змінної  $X$  розподіл  $\varepsilon$  та функцію регресії  $g$ . Обсяг вибірки  $n = 300$ .

Потрібно згенерувати дані відповідно до моделі регресії та оцінити функцію регресії, використовуючи оцінки

- у завданнях (1-5) оцінка ковзаючого середнього + ковзаюча медіана + локально-лінійна регресія з ядром Єпанечнікова;
- у завданнях (6-10) ковзаюча медіана + оцінка Надарая-Ватсона з ядром Єпанечнікова + проєкційна оцінка з базисом поліномів Лежандра.

Підбір параметра згладжування та вимірності простору проєкції виконувати на око.

(Як додатове завдання можна виконати підбір параметрів методом кросс-валідації).

- (1)  $X \sim N(0, 2)$ ,  $\varepsilon$  — рівномірний на  $[-0.3, 0.3]$ ,

$$g(x) = \begin{cases} -x^2 + 1 & \text{при } x < 0 \\ x^2 - 1 & \text{при } x \geq 0 \end{cases}$$

- (2)  $X$  рівномірно розподілений на  $[0, 3]$ ,  $\varepsilon \sim N(0, 0.3)$ ,

$$g(x) = 3x(9 - 9x + 2x^2)$$

- (3)  $X$  рівномірно розподілений на  $[0, 3]$ ,  $\varepsilon$  рівномірно розподілений на  $[-1, 1]$ ,

$$g(x) = -\frac{x}{7}(-242 + 805x - 742x^2 + 200x^3)$$

(4)  $X \sim N(0, 1)$ ,  $\varepsilon \sim N(0.5)$ ,

$$g(x) = 2|x|$$

(5)  $X \sim N(0, 2)$ ,  $\varepsilon$  — рівномірний на  $[-0.3, 0.3]$ ,

$$g(x) = \begin{cases} x^2 - 1 & \text{при } x < 0 \\ x & \text{при } x \geq 0 \end{cases}$$

(6)  $X \sim N(0, 2)$ ,  $\varepsilon$  — рівномірний на  $[-0.3, 0.3]$ ,

$$g(x) = \begin{cases} -x^2 + 1 & \text{при } x < 0 \\ x^2 - 1 & \text{при } x \geq 0 \end{cases}$$

(7)  $X$  рівномірно розподілений на  $[0, 3]$ ,  $\varepsilon \sim N(0, 0.3)$ ,

$$g(x) = 3x(9 - 9x + 2x^2)$$

(8)  $X$  рівномірно розподілений на  $[0, 3]$ ,  $\varepsilon$  рівномірно розподілений на  $[-1, 1]$ ,

$$g(x) = -\frac{x}{7}(-242 + 805x - 742x^2 + 200x^3)$$

(9)  $X \sim N(0, 1)$ ,  $\varepsilon \sim N(0.5)$ ,

$$g(x) = 2|x|$$

(10)  $X \sim N(0, 2)$ ,  $\varepsilon$  — рівномірний на  $[-0.3, 0.3]$ ,

$$g(x) = \begin{cases} x^2 - 1 & \text{при } x < 0 \\ x & \text{при } x \geq 0 \end{cases}$$





# Литература

- [1] Боровков А.А. (1997) Математическая статистика.
- [2] Гланц С.(1999) Медико-биологическая статистика.
- [3] Деврой Л., Дьерфи Л.(1988) Непараметрическое оценивание плотности.
- [4] Майборода Р. Є. Комп'ютерна статистика/ 2017.- 405с. Режим доступу:  
<http://probability.univ.kiev.ua/userfiles/mre/compsta.pdf>
- [5] Hardle, W., Muller, M., Sperlich, S., Werwatz A. (2004) Nonparametric and Semiparametric Models.
- [6] Shao J. Mathematical statistics.- Springer-Verlag: New York, 1998. - 530 р.
- [7] Larry Wasserman-All of Nonparametric Statistics.—Springer NY 2006.— 268.