# MS BGD MDI 720 : Statistiques

#### **François Portier** Télécom Paristech

Some of the contents were provided by Joseph Salmon http://josephsalmon.eu

#### Concept et origines du Bootstrap

Concept de racine statistique

Bien choisir la racine statistique : le *t*-bootstrap Racine pivotale Nombre de réplications

Le bootstrap en regression

#### Bootstrap : le principe général

#### $\underline{\mathsf{But}}$ : mesurer le degré de précision d'un estimateur $\hat{\theta}$

#### Le Boostrap : approche par re-echantillonage

#### Idée de base :

 $\hat{\theta}^*$  (connu) reproduit le comportement de  $\hat{\theta}$  (inconnu)

- $X_1, \ldots, X_n$  i.i.d.
- $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1,\ldots,X_n)$  une statistique/estimateur d'intérêt Examples : moyenne empirique  $\bar{X}_n$  ou médiane  $\mathrm{Med}_n(X_1,\ldots,X_n)$

#### Algorithme: Bootstrap

**Input** :  $X_1, \ldots, X_n$ , nombre d'itérations B

 ${f Output}$  : Estimateur Bootstrap  $(\hat{ heta}_1^*,\ldots,\hat{ heta}_B^*)$ 

- $X_1,\ldots,X_n$  i.i.d.
- $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1,\ldots,X_n)$  une statistique/estimateur d'intérêt Examples : moyenne empirique  $\bar{X}_n$  ou médiane  $\mathrm{Med}_n(X_1,\ldots,X_n)$

```
Algorithme: Bootstrap
```

```
Input : X_1, ..., X_n, nombre d'itérations B

Output : Estimateur Bootstrap (\hat{\theta}_1^*, ..., \hat{\theta}_B^*)
```

pour  $b = 1, \ldots, B$  faire

)

- $X_1,\ldots,X_n$  i.i.d.
- $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1,\ldots,X_n)$  une statistique/estimateur d'intérêt Examples : moyenne empirique  $\bar{X}_n$  ou médiane  $\mathrm{Med}_n(X_1,\ldots,X_n)$

#### Algorithme: Bootstrap

**Input** :  $X_1, \ldots, X_n$ , nombre d'itérations B

**Output**: Estimateur Bootstrap  $(\hat{\theta}_1^*, \dots, \hat{\theta}_B^*)$ 

pour  $b = 1, \ldots, B$  faire

(i) Tirer (uniformément) avec remise parmi  $X_1, \ldots, X_n$  pour obtenir un nouvel échantillon (aléatoire) :

échantillon Bootstrap :  $(X_1^*, \dots, X_n^*)$ 

- $X_1, \ldots, X_n$  i.i.d.
- $\hat{\theta} = \hat{\theta}(X_1,\ldots,X_n)$  une statistique/estimateur d'intérêt Examples : moyenne empirique  $\bar{X}_n$  ou médiane  $\mathrm{Med}_n(X_1,\ldots,X_n)$

#### Algorithme: Bootstrap

**Input** :  $X_1, \ldots, X_n$ , nombre d'itérations B

**Output** : Estimateur Bootstrap  $(\hat{\theta}_1^*, \dots, \hat{\theta}_B^*)$ 

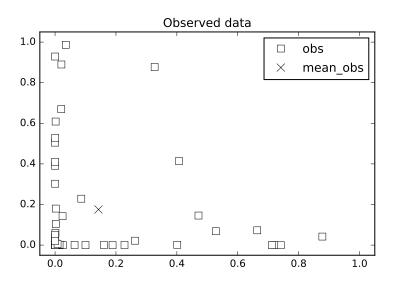
pour  $b = 1, \ldots, B$  faire

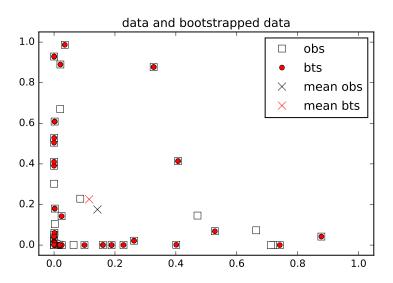
(i) Tirer (uniformément) avec remise parmi  $X_1, \ldots, X_n$  pour obtenir un nouvel échantillon (aléatoire) :

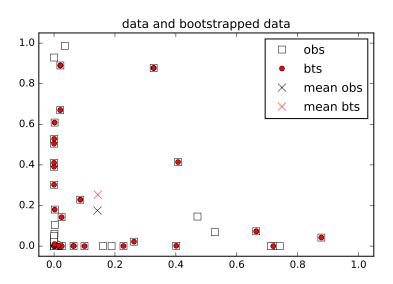
échantillon Bootstrap :  $(X_1^*, \dots, X_n^*)$ 

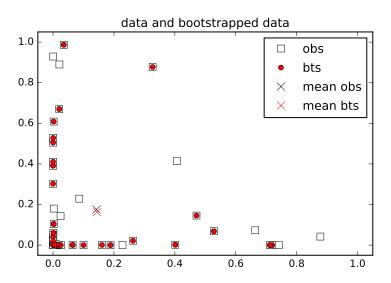
(ii) Calculer l'estimateur/la statistique sur cet échantillon

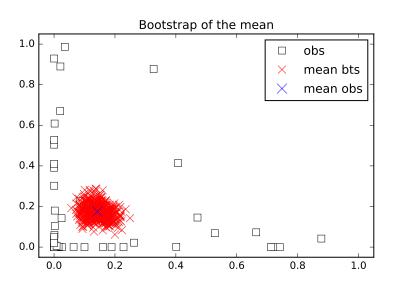
$$\hat{\theta}_b^* = \hat{\theta}(X_1^*, \dots, X_n^*)$$

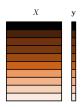


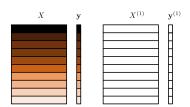


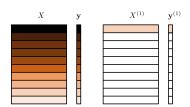


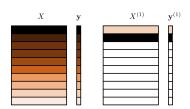


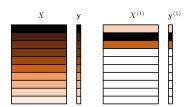


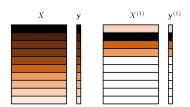


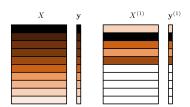


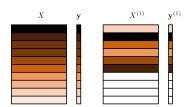


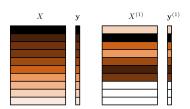


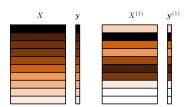


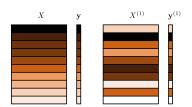


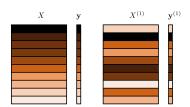


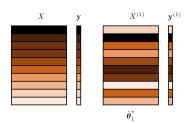


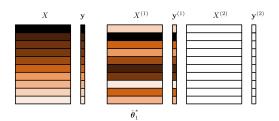


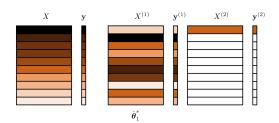


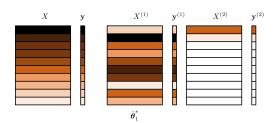


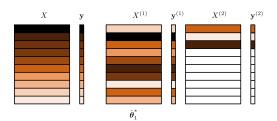


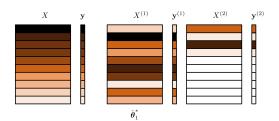


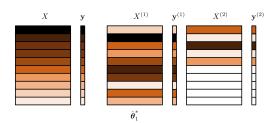


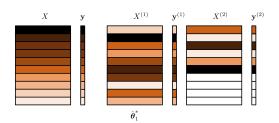


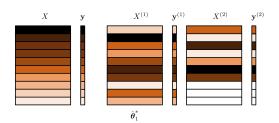


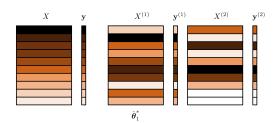


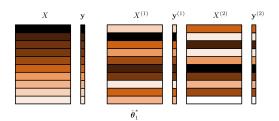


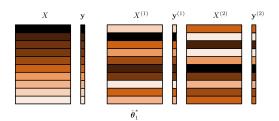






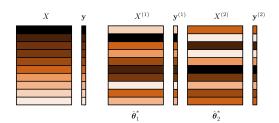






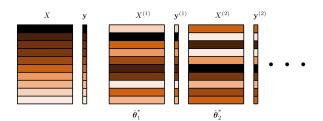
# Bootstrap (des paires) en régression

Soit  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$  et  $y \in \mathbb{R}^n$ 



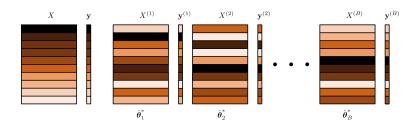
# Bootstrap (des paires) en régression

Soit  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$  et  $y \in \mathbb{R}^n$ 



# Bootstrap (des paires) en régression

Soit  $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$  et  $y \in \mathbb{R}^n$ 



# Premiers estimateurs bootstrap

Soit  $\theta_0$  le paramètre d'intérêt (inconnu)

	le vrai (inconnu)	le bootstrap
biais	$\mathbb{E}[\hat{ heta}] -  heta_0$	$B^{-1} \sum_{b=1}^{B} \hat{\theta}_{b}^{*} - \hat{\theta}$
variance	$\mathbb{E}[(\hat{ heta} - \mathbb{E}[\hat{ heta}])^2]$	$B^{-1} \sum_{b=1}^{b=1} (\hat{\theta}_b^* - B^{-1} \sum_{b=1}^{B} \hat{\theta}_b^*)^2$
mean-square error	$\boxed{\mathbb{E}[(\hat{\theta}-\theta_0)^2]}$	$B^{-1} \sum_{b=1}^{B} (\hat{\theta}_b^* - \hat{\theta})^2$
quantiles density		

Les statistiques  $\hat{ heta}_1^*,\dots,\hat{ heta}_B^*$  sont des "versions" bootstrap de  $\hat{ heta}$ 

#### Comment les utiliser?

## Origine Efron et Tibshirani (1993)

Le terme "bootstrap" provient de la phrase :

"to pull oneself up by one's own bootstrap"

issue de "The Surprising Adventures of Baron Munchausen" by R. E. Raspe (18th century)

## Idée Efron (1979)

En se basant uniquement sur les données observées, reproduire la distribution d'une statistique, *e.g.*, moyennes, écart-type, corrélation, etc.

#### Pas de théorie asymptotique!

#### Concept et origines du Bootstrap

#### Concept de racine statistique

Bien choisir la racine statistique : le *t*-bootstrap Racine pivotale Nombre de réplications

Le bootstrap en regression

# Racine statistique

#### Definition

Une racine statistique  $\hat{R}$  est une fonction de  $(X_1,\ldots,X_n)$  qui converge en distribution vers G i.e., $\hat{R} \leadsto G$ 

## **Examples**

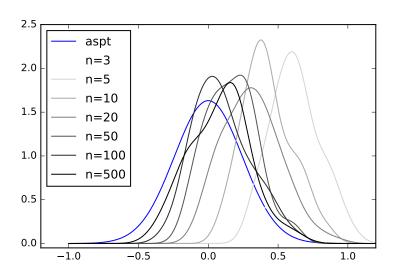
Let  $X_1, \ldots, X_n$  be *i.i.d.* with distribution  $\mathcal{U}[0,1]$ 

- la moyenne,  $n^{1/2}(n^{-1}\sum_{i=1}^n X_i 1/2)$
- ▶ la cdf,  $n^{1/2}(n^{-1}\sum_{i=1}^n 1_{\{X_i \leqslant x\}} x)$
- le minimum,  $n(\min_{1 \leq i \leq n} X_i)$
- ▶ la variance, ...

## Notre contexte : le cas régulier

$$n^{1/2}(\hat{\theta}-\theta_0) \rightsquigarrow \mathcal{N}(0,\sigma^2)$$

# Exemple numérique



Exemple d'une racine dont le biais est positif

# Bootstrapper une racine

La racine choisie  $\hat{R}$  est donnée par le problème considéré

#### But du bootstrap

reproduire le "comportement" d'une racine statistique

#### 2 étapes :

- (étape de définition)\* Trouver la racine bootstrap  $\hat{R}^*$  qui reproduit la racine d'intérêt  $\hat{R}$
- (étape d'approximation)\*\* Pour B (grand), calculer  $\hat{R}_1^*, \dots, \hat{R}_B^*$  et approcher la loi de  $\hat{R}$

<sup>\*</sup>pour l'étape de définition : bon sens et théorie asymptotique

<sup>\*\*</sup>pour l'étape d'approximation : simulation de Monte Carlo

# **Exemples**

#### Example 1: La moyenne

## Supposons

$$\theta_0 = \int x dP(x)$$
  $\hat{\theta} = \bar{X}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$   $\sigma^2 = \int (x - \theta_0)^2 dP(x)$ 

D'après le TCL, si 
$$\mathbb{E}[X_1^2]<+\infty$$
, alors  $\hat{R}=n^{1/2}(\hat{\theta}-\theta_0)\leadsto\mathcal{N}(0,\sigma^2)$ 

Une version bootstrap pour  $\hat{R}$  est

$$\hat{R}^* = n^{1/2}(\hat{\theta}^* - \hat{\theta}), \qquad \hat{\theta}^* = \bar{X}^*$$

# **Exemples**

#### Exemple 2: la variance

Soient

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i,$$
  $\hat{\sigma}^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2$ 

Si 
$$\mathbb{E}[X_1^4]<+\infty$$
, alors  $\hat{R}=n^{1/2}(\hat{\sigma}^2-\sigma^2)\leadsto\mathcal{N}(0,v),$ 

avec  $v = \mathrm{var}((X - \mathbb{E}[X])^2).$  Une version bootstrap de  $\hat{R}$  est

$$\hat{R}^* = n^{1/2}(\hat{\sigma}^{*2} - \hat{\sigma}^2),$$
  $\hat{\sigma}^{*2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i^* - \bar{X}^*)^2$ 

## Quantiles d'une racine

Notation :  $\xi_{\alpha}$  le  $\alpha$ -quantile de  $n^{1/2}(\hat{\theta}-\theta_0)$ 

#### Les quantiles sont très utiles pour...

... créer des intervalles de confiance, i.e.,

$$\mathbb{P}\left(\theta_0 \in [\hat{\theta} - \xi_{1-\alpha/2}/n^{1/2}, \hat{\theta} - \xi_{\alpha/2}/n^{1/2}]\right) = 1 - \alpha.$$

...faire des **tests**, *i.e.*,sous 
$$H_0: \theta_0 = 1$$
 
$$\mathbb{P}\left(n^{1/2}(\hat{\theta}-1) \leqslant \xi_{\alpha/2} \text{ or } n^{1/2}(\hat{\theta}-1) \geqslant \xi_{1-\alpha/2}\right) = \alpha$$

# Intervalle de confiance : Bootstrap vs asymptotique

#### Asymptotique:

$$\left[\hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}} \xi_{1-\frac{\alpha}{2}}^{(\infty)}, \hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}} \xi_{\frac{\alpha}{2}}^{(\infty)}\right]$$

ou  $\xi_{\alpha}^{(\infty)}$  est le  $\alpha$ -quantile d'une loi normale standardisée et  $\hat{\sigma}^2 = n^{-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X}_n)^2$ 

#### **Bootstrap**:

$$\left[\hat{\theta}_n - \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{B,1-\frac{\alpha}{2}}, \hat{\theta}_n - \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{B,\frac{\alpha}{2}}\right]$$

ou  $\hat{\xi}_{B,\alpha}$  est un estimateur bootstrap du  $\alpha$ -quantile de  $n^{1/2}(\hat{\theta}-\theta_0)$  basé sur B échantillon bootstrap

#### Exo

Ecrire un algorithme pour calculer  $\hat{\xi}_{B,\alpha}$ 

# Bootstrap vs asymptotique

#### But

Obtenir la distribution **inconnue** de  $n^{1/2}(\hat{\theta} - \theta_0)$ 

#### 2 possibilités

La distribution **asymptotique** (estimée), *i.e.*,

$$\mathcal{N}(0,\hat{\sigma}^2)$$

La distribution **bootstrap**, *i.e.*, la distribution de

$$n^{1/2}(\hat{\theta}^* - \hat{\theta})$$

## Bootstrap vs asymptotique

#### Différence importante 1

L'utilisation du bootstrap ne requiert aucune considération théorique comme le calcul, parfois difficile de la loi asymptotique (e.g., intervalle de confiance pour la variance).

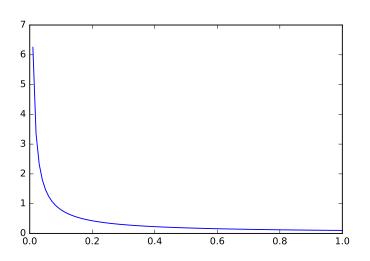
#### Différence importante 2

Le bootstrap est basé sur la simulation de

$$n^{1/2}(\hat{\theta}_b^* - \hat{\theta}), \qquad b = 1, \dots B$$

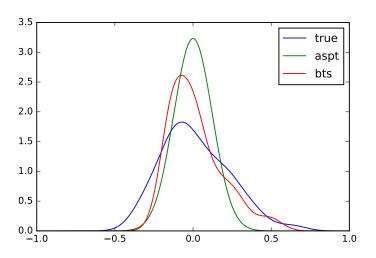
pour approcher la loi cible de  $\hat{R}$ .

# **Bootstrap vs asymptotic**



Graphe de la densité d'une  $\mathit{beta}(.1,1)$ 

## Bootstrap vs asymptotic



Graphe de la distribution théorique (la vraie), bootstrap et asymptotique de la racine dans le cas de la moyenne d'une beta(.1,1)

# Bootstrap vs asymptotique

```
import numpy as np
from scipy.stats import gaussian_kde
from scipy.stats import norm
import matplotlib.pyplot as plt
```

```
# Generation of the data
np.random.seed(1)
n = 20
a = .1
b = 1
X = np.random.beta(a, b, n)
```

## Bootstrap vs asymptotique

```
# Asymptotic
sigma = np.std(X)
x = .56
print(norm.pdf(x, loc=0, scale=sigma))
```

```
# Bootstrap
B = 50
Xstarbarme = np.zeros([1, B])

for i in range(B):
    Xstar = X[np.random.randint(n, size=n)]
    Xstarbarme[:, i] = np.mean(Xstar)
Xstarbarme = np.sqrt(n) * (Xstarbarme - np.mean(X))
density_boot = gaussian_kde(Xstarbarme)
```

#### 1er conclusions

- Le bootstrap est "sample-based" (pas de théorie asymptotique)
- ► Facile à utiliser :
  - (i) pas de théorie asymptotique
  - (ii) parallélisable
  - (iii) pas besoin d'estimer  $\sigma$

## Autres exemples

- Covariance
- Correlation coefficient
- Regression coefficient
- Testing the rank of a matrix
- etc.

#### Concept et origines du Bootstrap

Concept de racine statistique

Bien choisir la racine statistique : le t-bootstrap Racine pivotale Nombre de réplications

Le bootstrap en regression

# Racine pivotale

#### Définition

Une statistique est pivotale lorsque sa distribution limite ne dépend pas de  $\mathbb P$ 

#### Exemples

- ullet la moyenne,  $n^{1/2}\left(rac{ar{X}-EX}{\hat{\sigma}}
  ight)$  avec  $\hat{\sigma}^2=n^{-1}\sum_{i=1}^n(X_i-ar{X})^2$
- ▶ la cdf,  $n^{1/2}\left(\frac{\hat{F}(x) F(x)}{\hat{F}(x)^{1/2}(1 \hat{F}(x))^{1/2}}\right)$  avec  $\hat{F}(x) = n^{-1}\sum_{i=1}^n 1_{\{X_i \le x\}}$

#### Point utile

Pour obtenir une statistique pivotale, on doit estimer la variance

# Le t-bootstrap

#### Idée

bootstrap basique :  $n^{1/2}(\hat{\theta}^* - \hat{\theta})$  imite  $n^{1/2}(\hat{\theta}^* - \theta_0)$  t-bootstrap\* :  $n^{1/2}\left(\frac{\hat{\theta}^* - \hat{\theta}}{\hat{\sigma}^*}\right)$  imite  $n^{1/2}\left(\frac{\hat{\theta} - \theta_0}{\hat{\sigma}}\right)$ 

#### Approximation\*\*

Supposons que  $n^{1/2}(\hat{\theta}-\theta_0) \leadsto \mathcal{N}(0,\sigma)$  dont la cdf est noté  $\Phi$ 

- Asymptotique :  $|\Phi(y) \mathbb{P}(n^{1/2}(\hat{\theta} \theta_0) \leqslant y)| \simeq \frac{C}{\sqrt{n}}$
- ▶ bootstrap basique :  $|\mathbb{P}_*(n^{1/2}(\hat{\theta}^* \hat{\theta}) \leq y) \mathbb{P}(n^{1/2}(\hat{\theta} \theta_0) \leq y)| \simeq \frac{C}{\sqrt{n}}$
- t-bootstrap :  $|\mathbb{P}_*(n^{1/2}\left(\frac{\hat{\theta}^* \hat{\theta}}{\hat{\sigma}^*}\right) \leqslant y) \mathbb{P}(n^{1/2}\left(\frac{\hat{\theta} \theta_0}{\hat{\sigma}}\right) \leqslant y)| \simeq \frac{C}{n}$

<sup>\*</sup>t pour studentization

<sup>\*\*</sup>Basée sur des expansions d'Edgeworth [Hal92]

#### **Confidence interval**

$$\begin{array}{ll} \xi_{\alpha}^{(\infty)} : \alpha\text{-quantile d'une } \mathcal{N}(0,1) & \hat{\xi}_{B,\alpha}^{(bb)} : \alpha\text{-quantile de } \sqrt{n}(\hat{\theta}^* - \hat{\theta}) \\ \hat{\xi}_{B,\alpha}^{(tb)} : \alpha\text{-quantile de } \sqrt{n}\left(\frac{\hat{\theta}^* - \hat{\theta}}{\hat{\sigma}^*}\right) & \hat{q}_{\alpha} : \alpha\text{-quantile de} \hat{\theta}^* \end{array}$$

	formulas	accuracy
asymp.	$\left[\hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}} \xi_{1-\alpha/2}^{(\infty)},  \hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}} \xi_{\alpha/2}^{(\infty)}\right]$	$n^{-1/2}$
basic boot.	$\left[\hat{\theta} - \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{1-\alpha/2}^{(bb)},  \hat{\theta} - \frac{1}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{\alpha/2}^{(bb)}\right]$	$n^{-1/2}$
t-boot.	$\left[\hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{1-\alpha/2}^{(tb)},  \hat{\theta} - \frac{\hat{\sigma}}{\sqrt{n}}\hat{\xi}_{\alpha/2}^{(tb)}\right]$	$n^{-1}$
percentile boot.	$\left[\hat{q}_{lpha/2},\hat{q}_{1-lpha/2} ight]$	$n^{-1/2}$

#### Remarques

- ▶ pas d'estimation de la variance pour le bootstrap basique et le percentile
- ▶ le plus précis est le *t*-bootstrap
- $\blacktriangleright$  le percentile est simple et donne des intervalles dans l'image de  $\theta$

## **Aspect computationnel**

**Étape d'approximation** : Calculer  $\hat{R}_1^*,\dots,\hat{R}_B^*$  et approcher la loi de  $\hat{R}$ 

- Le Bootstrap est très demandeur en temps de calcul
- Le Bootstrap est "parallélisable de manière embarrassante"

#### Choix de B

- Les procédures dont la précision est  $1/\sqrt{n}:B$  devra être de l'ordre de n
- Les procédures dont la précision est 1/n:B devra être de l'ordre de  $n^2$

#### Concept et origines du Bootstrap

Concept de racine statistique

Bien choisir la racine statistique : le *t*-bootstrap Racine pivotale Nombre de réplications

Le bootstrap en regression

## Model de régression

$$\mathbf{y} = g(\mathbf{x}) + \sigma(\mathbf{x})\epsilon$$

- X est aléatoire, *i.e.*, "random design" ( $\epsilon$  et X indépendants)
- X n'est pas aléatoire, i.e., "deterministic design"

**But**: estimer g

problème semi-paramétrique spécifique ⇒ Bootstrap spécifique

## 2 stratégies pour le bootstrap

- Bootstrap classique : bootstrap des paires
  - ⇒ OK pour "random design"
- Bootstrap des résidus
  - ⇒ OK pour "random" et "deterministic design"

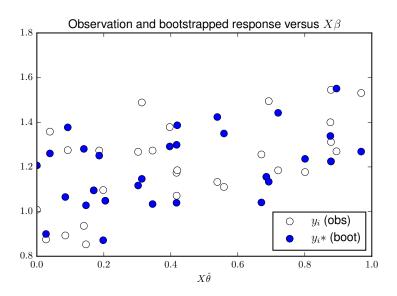
# Bootstrap des résidus

## Algorithme

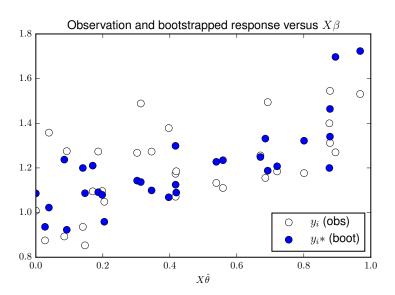
Soient  $(y_1, x_1, \dots, y_n, x_n)$ . Calculer  $\hat{g}$  et les résidus estimés  $\hat{r}_i = y_i - \hat{g}(x_i)$ . Initialiser b = 1

- 1. Tirer uniformément avec remise dans  $\hat{r}_1, \ldots, \hat{r}_n$ . Cela donne  $(\hat{r}_1^*, \ldots, \hat{r}_n^*)$
- 2. Pour i = 1, ..., n, calculer  $y_i^* = \hat{g}(x_i) + \hat{r}_i^*$
- 3. A partir de  $(y_1^*, x_1, \dots, y_n^*, x_n)$ , calculer  $\hat{g}_b^*$
- 4. Stop si b=B sinon itérer

## **Bootstrap of the residuals**



## **Bootstrap of the residuals**



## syllabus I

- P. Bertail, Université Paris Ouest (see webpage)
- L. Simard Université catholique de Louvain
- J. Wellner, University of Washington (see webpage)

#### References I

B. Efron.
 Bootstrap methods: another look at the jackknife.
 Ann. Statist., 7(1):1–26, 1979.

- Bradley Efron and Robert J. Tibshirani.
   An introduction to the bootstrap, volume 57 of Monographs on Statistics and Applied Probability.
   Chapman and Hall, New York, 1993.
- Peter Hall.
   The bootstrap and Edgeworth expansion.
   Springer Series in Statistics. Springer-Verlag, New York, 1992.