EDNP_2020

September 9, 2020

1 Inferencia Estadística

1.1 Estimación de densidad no paramétrica (EDNP)

Víctor Muñiz. Septiembre 2020.

1.2 Introducción.

Dada una secuencia de variables aleatorias independientes e identicamente distribuidas $x_1, x_2, \ldots x_n$ con función de densidad comúnn $f(x)$,

- ¿Cómo podemos estimar $f(x)$?

  (Parzen, E. *On estimation of a Probability Density Function and Mode*, 1962)

Un esquema tradicional de análisis de datos.

Ejemplo: Estimación de la velocidad de la luz experimentalmente (Michaelson & Morley, 1986).

Un esquema tradicional de análisis de datos.

Ejemplo: Estimación de la velocidad de la luz experimentalmente (Michaelson & Morley, 1986).

- Estimamos su densidad

Un esquema tradicional de análisis de datos.

Ejemplo: Estimación de la velocidad de la luz experimentalmente (Michaelson & Morley, 1986).

- ¿Qué modelo es el adecuado?
  - Esto dependerá de varios factores, por ejemplo, la naturaleza de los datos, el conocimiento apriori del fenómeno estudiado o la experiencia del analista.

Un esquema tradicional de análisis de datos.

Ejemplo: Estimación de la velocidad de la luz experimentalmente (Michaelson & Morley, 1986).

- Ajustemos un modelo normal, los parámetros $\theta = (\mu, \sigma)$ los estimamos de la muestra.

Un esquema tradicional de análisis de datos.

- Bajo éste esquema, todo el conocimiento que obtengamos del fenómeno bajo estudio proviene de **EL modelo** que escojamos, que a su vez nos proveé **LA función** de densidad de los datos.

- La modelación estadística tradicional escoge algún modelo paramétrico conocido para $f(x)$, por ejemplo, Normal, Gamma, Exponencial, etc…

- Esto tiene mucho sentido para fenómenos muy estudiados y analizados (estudios de confiabilidad, por ejemplo)
- Sin embargo, para fenómenos o datos más complejos, no siempre es conveniente o válido suponer una distribución de antemano. Verás muchos ejemplos más adelante.

1.3 EDNP

En EDNP, no hacemos supuestos distribucionales sobre los datos.

Dado un conjunto de datos $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^d$ (por simplicidad, empezaremos consideraremos el caso univariado):

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n) \sim f(\mathbf{x}),$$

queremos estimar **UNA** distribuci'on de densidad $\hat{f}(\mathbf{x})$ que aproxime a $f(\mathbf{x})$ tal que

$$\hat{f}(\mathbf{x}) \geq 0$$

$$\int_{\mathbb{R}} \hat{f}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = 1,$$

(*bona fide* density).

¿Qué nos gustaría de $\hat{f}(\mathbf{x})$?

Que se parezcan:

$$E\hat{f}(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}).$$

Si $\hat{f}(\mathbf{x})$ es una estimaci'on basada en una muestra de tamaño n, ésta característica nos asegura que

$$E\hat{f}(\mathbf{x}) \to f(\mathbf{x}) \text{ cuando } n \to \infty$$

(insesgado)

¿Qué nos gustaría de $\hat{f}(\mathbf{x})$?

Que converja a la vedadera distribución:

$$\hat{f}(\mathbf{x}) \xrightarrow{P} f(\mathbf{x})$$

(consistente)

Para esto, debemos definir una forma de medir la diferencia entre ambas distribuciones…

1.4 El histograma

Es quizá el método no paramétrico más usado para estimar y visualizar una densidad. El método es muy simple.

Supongamos que $\mathbf{x} \in [a, b]$

- Crea una partición fija de M celdas disjuntas $T_0, T_1, \ldots, T_{M-1}$ que comprendan el intervalo $[a, b]$, cada una con un ancho h.
- La densidad se estima mediante:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{m=0}^{M-1} N_m I_{T_m}(x),$$

  donde
  - I_{T_m} es la función indicadora del intervalo m,
  - $N_m = \sum_{i=1}^{n} I_{T_m}(x_i)$, es decir, el número de valores que caen en la celda T_m

Las desventajas del histograma como un estimador de la densidad han sido mencionadas por varios autores. Por ejemplo:

- Celdas fijas
- Discontinuidades en las fronteras de las celdas
- Selección del origen del histograma

Ejemplo: NYC flights 2013. Registros de vuelos saliendo del aeropuerto de NYC (Hadley Wickham, 2018)

[277]:
```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
plt.style.use('seaborn-white')

flights = pd.read_csv('complete_flights.csv', index_col=0)[['arr_delay',␣
 ↪'carrier', 'name']]
flights.dropna(inplace=True)
flights.head()
```

[277]:
```
   arr_delay carrier                    name
0       11.0      UA   United Air Lines Inc.
1       20.0      UA   United Air Lines Inc.
2       33.0      AA  American Airlines Inc.
3      -18.0      B6         JetBlue Airways
4      -25.0      DL    Delta Air Lines Inc.
```

[278]:
```
import ipywidgets as widgets
from IPython.display import display
from ipywidgets import interactive, fixed

def select_values(array):
    unique = array.unique().tolist()
```

```
    unique.sort()
    return unique

def plot_hist(h_bins, h_range, aerolinea):
    data_flights = flights.loc[flights.name == aerolinea,'arr_delay'].to_numpy()
    num_bins = int((h_range[1]-h_range[0])/h_bins)
    plt.hist(data_flights, range = h_range, bins = num_bins, density = True,␣
 ↪alpha=0.5,
                      histtype='stepfilled', color='steelblue', edgecolor='none')
    plt.title('Histograma')
    plt.show()
```

[279]:
```
hist_bin = widgets.IntSlider(
    value=5,
    min=1,
    max=30,
    step=1,
    description='Bin (min)',
    disabled=False,
    continuous_update=True,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
    readout_format='d'
)

hist_range = widgets.IntRangeSlider(
    value=init_range,
    min=-60,
    max=180,
    step=5,
    description='Range (min)',
    disabled=False,
    continuous_update=True,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
    readout_format='d',
)
dropdown_name = widgets.Dropdown(options = select_values(flights.name))
```

[280]:
```
interactive_plot = interactive(plot_hist, aerolinea = dropdown_name, h_bins =␣
 ↪hist_bin, h_range = hist_range)
output = interactive_plot.children[-1]
#output.layout.height = '350px'
interactive_plot
```

```
interactive(children=(IntSlider(value=5, description='Bin (min)', max=30, min=1), IntRangeSlid
```

1.5 Estimación usando un kernel (KDE)

1.5.1 KDE univariado

Es el método mas popular. Para el caso univariado, el KDE está dado por

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{nh}\sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right), \qquad x \in \mathbb{R}, h > 0.$$

K es la función Kernel, y h es el **ancho de banda**, que determina la suavidad de la estimación.

Bajo condiciones no muy restrictivas (h debe decrecer cuando n aumenta), puede mostrarse que KDE converge en probabilidad a la verdadera densidad.

Dado un kernel K y un ancho de banda h, la KDE es *única* para un conjunto de datos específico, entonces, **no depende** de la selección del origen, como pasa con los histogramas.

El Kernel K

- Puede ser una función de densidad también, generalmente se selecciona una función unimodal y simétrica.
- El centro del kernel se coloca sobre cada dato x_i
- La influencia de cada dato se propaga en su vecindad
- La contribución de cada punto se suma para la estimación total

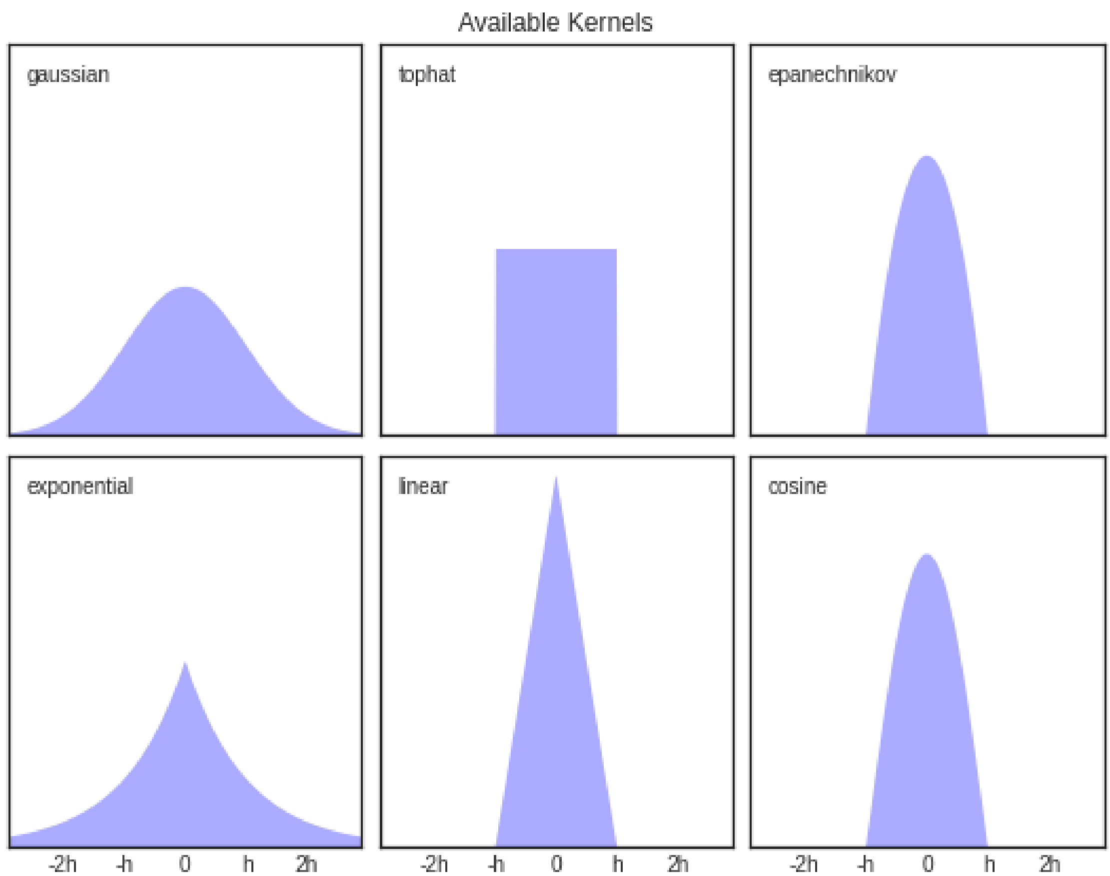
Kernels generalmente usados (python, R)

[281]:
```python
X_plot = np.linspace(-6, 6, 1000)[:, None]
X_src = np.zeros((1, 1))

def format_func(x, loc):
    if x == 0:
        return '0'
    elif x == 1:
        return 'h'
    elif x == -1:
        return '-h'
    else:
        return '%ih' % x
```

[300]:
```python
fig, ax = plt.subplots(2, 3, figsize=(8, 7), sharex=True, sharey=True)
fig.subplots_adjust(left=0.05, right=0.95, hspace=0.05, wspace=0.05)

for i, kernel in enumerate(['gaussian', 'tophat', 'epanechnikov',
                            'exponential', 'linear', 'cosine']):
    axi = ax.ravel()[i]
    log_dens = KernelDensity(kernel=kernel).fit(X_src).score_samples(X_plot)
    axi.fill(X_plot[:, 0], np.exp(log_dens), '-k', fc='#AAAAFF')
    axi.text(-2.6, 0.95, kernel)
    axi.xaxis.set_major_formatter(plt.FuncFormatter(format_func))
```

```
    axi.xaxis.set_major_locator(plt.MultipleLocator(1))
    axi.yaxis.set_major_locator(plt.NullLocator())
    axi.set_ylim(0, 1.05)
    axi.set_xlim(-2.9, 2.9)

ax[0, 1].set_title('Available Kernels')
```

[300]: Text(0.5, 1.0, 'Available Kernels')



Más importante que el Kernel, es la elección del ancho de banda.

El ancho de banda h

- Es un factor de escala
- Controla la suavidad o rugosidad de la estimación
- Introducimos un concepto importante: sobreestimación (o sobreajuste)
- Esto a su vez, lleva a otro concepto aún mas importante: *Bias-Variance tradeoff*

¿Cómo elegimos h?

- A "ojo" (¿qué quieres ver?)

[283]:
```
from sklearn.neighbors import KernelDensity

def plot_kde1(h_bins, h_range, aerolinea, kern, h):
    data_flights = flights.loc[flights.name == aerolinea,'arr_delay'].to_numpy()

    x_grid = np.linspace(-60, 180, 5000)[:, np.newaxis]
    kde = KernelDensity(bandwidth=h, kernel=kern)
    kde.fit(data_flights[:, np.newaxis])
    pdf = np.exp(kde.score_samples(x_grid))

    fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 4), subplot_kw={'facecolor':
 ↪'#EEEEEE','axisbelow':True})
    num_bins = int((h_range[1]-h_range[0])/h_bins)
    ax.hist(data_flights, range = h_range, bins = num_bins, density = True,␣
 ↪alpha=0.5,
                     histtype='stepfilled', color='steelblue', edgecolor='none')
    ax.plot(x_grid, pdf , '-k', lw=2, alpha=0.5)

    return fig
```

[284]:
```
hist_bin = widgets.IntSlider(
    value=5,
    min=1,
    max=30,
    step=1,
    description='Bin (min)',
    disabled=False,
    continuous_update=False,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
    readout_format='d'
)

hist_range = widgets.IntRangeSlider(
    value=init_range,
    min=-60,
    max=180,
    step=5,
    description='Range (min)',
    disabled=False,
    continuous_update=False,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
    readout_format='d',
)
```

```
[285]: kernel_h = widgets.FloatSlider(
    value= 0.6,
    min= 0.2,
    max= 20,
    step= 0.2,
    description='bandwidth',
    disabled=False,
    continuous_update=False,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
)

dropdown_name = widgets.Dropdown(options = select_values(flights.name))

dropdown_kernel = widgets.Dropdown(options = ['gaussian', 'tophat',␣
 ↪'epanechnikov', 'exponential',
                                              'linear', 'cosine'], value =␣
 ↪'gaussian', description='Kernel:')
```

```
[286]: interactive_plot = interactive(plot_kde1, aerolinea = dropdown_name, h_bins =␣
 ↪hist_bin, h_range = hist_range,
                              kern = dropdown_kernel, h = kernel_h)
output = interactive_plot.children[-1]
#output.layout.height = '350px'
interactive_plot
```

```
interactive(children=(IntSlider(value=5, continuous_update=False, description='Bin (min)', max=
```

¿Cómo elegimos h?

- A "ojo" (¿qué quieres ver?)
- Dos criterios:
  - Normal scale rule (también conocida como "rule of thumb")
  - Validación cruzada (CV)

Criterios para elegir h

- Mean Square Error (MSE)
- Integrated Squared Error (ISE)
- Mean Integrated Squared Error (MISE)

Criterios para elegir h

- Normal scale rule (también conocida como "rule of thumb")
  - Asume que f es Normal, y calcula h óptima que minimice MISE según este supuesto.
  - Puede mostrarse que, si usamos un kernel Gaussiano, el h óptimo bajo este esquema es $ h^{ROT}=1.06 s n^{-1/5}$, con s es la estimaci'on de σ.
  - La opción por default en la mayoría de softwares

    - Bien para un primer vistazo, pero tiende a suavizar de mas cuando f es multimodal o claramente no-Gaussiana.
- Validación cruzada: utiliza el criterio *leave-one-out* CV.

1.5.2 KDE multivariado

La extensi'on al caso multivariado es sencilla:

$$\hat{f}_{\mathbf{H}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n|\mathbf{H}|}\sum_{i=1}^{n} K(\mathbf{H}^{-1}(\mathbf{x}-\mathbf{x}_i)), \qquad \mathbf{x}\in\mathbb{R}^d,$$

donde $\mathbf{H}$ es una matriz de $d \times d$ no singular que generaliza el ancho de banda h, y K es una función con media $\mathbf{0}$ e integra 1.

Ejemplo. Datos simulados.

[287]:
```
def kde2D(x, y, h):
    xy = np.vstack([x,y])
    d = xy.shape[0]
    n = xy.shape[1]
    # utilizo el kernel Gaussiano
    kde = KernelDensity(bandwidth=h, metric='euclidean', kernel='gaussian',␣
 ↪algorithm='ball_tree')
    kde.fit(xy.T)

    xmin = x.min()
    xmax = x.max()
    ymin = y.min()
    ymax = y.max()
    X, Y = np.mgrid[xmin:xmax:100j, ymin:ymax:100j]
    positions = np.vstack([X.ravel(), Y.ravel()])
    Z = np.reshape(np.exp(kde.score_samples(positions.T)), X.shape)

    fig, ax = plt.subplots(figsize=(6, 6))
    #ax.imshow(np.rot90(Z), cmap=plt.cm.viridis, extent=[xmin, xmax, ymin,␣
 ↪ymax])
    ax.pcolormesh(xx, yy, Z, shading = 'auto', cmap=plt.cm.viridis)
    ax.scatter(x, y, s=2, facecolor = 'white') #, edgecolor='')
    ax.set_xlabel('$x$')
    ax.set_ylabel('$y$')
    ax.set_title('KDE')
    ax.set_xlim((-3,3))
    ax.set_ylim((-3,3))

    return fig
```

[288]:
```
# el parámetro en un slider
kernel_h = widgets.FloatSlider(
```

```
    value= 0.2,
    min= 0.01,
    max= 3,
    step= 0.01,
    description='bandwidth',
    disabled=False,
    continuous_update=False,
    orientation='horizontal',
    readout=True,
)
```

[289]:
```
# Genero algunos datos en 2 dimensiones
N1 = np.random.normal(size=500)
N2 = np.random.normal(scale=0.5, size=500)
x = N1+N2
y = N1-N2

interactive_plot = interactive(kde2D, x=fixed(x), y=fixed(y), h=kernel_h)
output = interactive_plot.children[-1]
interactive_plot
```

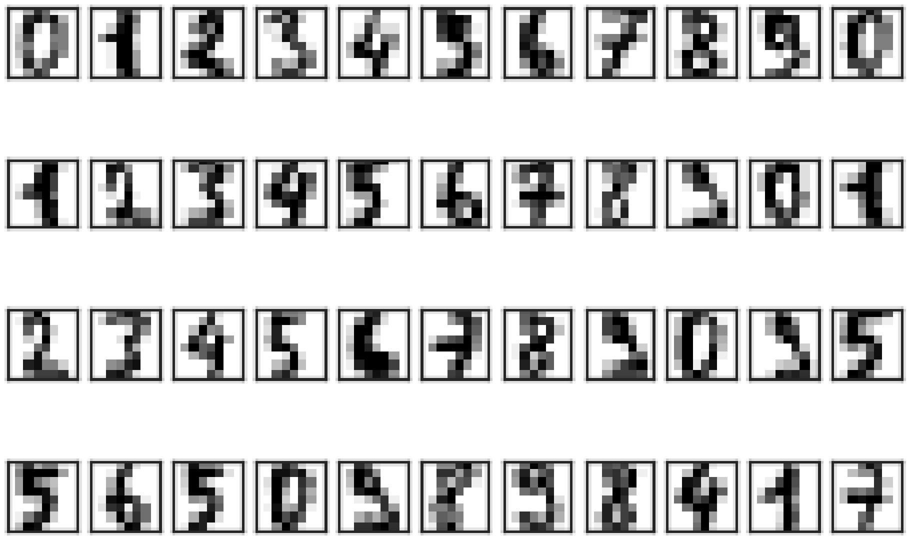
```
interactive(children=(FloatSlider(value=0.2, continuous_update=False, description='bandwidth',
```

1.5.3 KDE como un modelo generativo

[290]:
```
from sklearn.datasets import load_digits
from sklearn.neighbors import KernelDensity
from sklearn.decomposition import PCA
from sklearn.model_selection import GridSearchCV

# load the data
digits = load_digits()
data = digits.data
```

Los datos reales (digitos en tamaño 8 x 8 pixeles)

[291]:
```
real_data = digits.data[:44].reshape((4, 11, -1))
# plot real digits and resampled digits
fig, ax = plt.subplots(4, 11, subplot_kw=dict(xticks=[], yticks=[]))
for j in range(11):
    for i in range(4):
        im = ax[i, j].imshow(real_data[i, j].reshape((8, 8)),
                             cmap=plt.cm.binary, interpolation='nearest')
        im.set_clim(0, 16)
```



[297]:
```
def kde_digits(data, bw):
    kde = KernelDensity(bandwidth=bw)
    kde.fit(data)
    # sample 44 new points from the data
    new_data = kde.sample(44, random_state=0)

    new_data = new_data.reshape((4, 11, -1))
    fig, ax = plt.subplots(4, 11, subplot_kw=dict(xticks=[], yticks=[]))
    for j in range(11):
        for i in range(4):
            im = ax[i, j].imshow(new_data[i, j].reshape((8, 8)),
                                 cmap=plt.cm.binary, interpolation='nearest')
            im.set_clim(0, 16)

    ax[0, 5].set_title('"New" digits drawn from the kernel density model')

    return fig
    #plt.show()
```

[298]:
```
kernel_h = widgets.FloatSlider(
    value= 10,
    min= 0.1,
    max= 15,
    step= 0.5,
    description='bandwidth',
    disabled=False,
    continuous_update=False,
    orientation='horizontal',
```

```
    readout=True,
)
```

[299]:
```
interactive_plot = interactive(kde_digits, data=fixed(data), bw=kernel_h)
output = interactive_plot.children[-1]
#output.layout.height = '350px'
interactive_plot
```

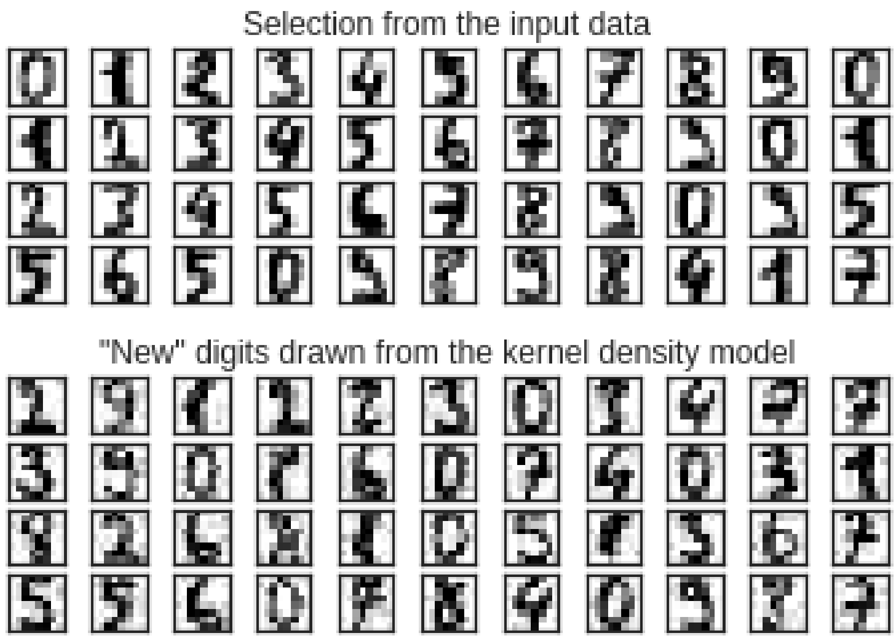
```
interactive(children=(FloatSlider(value=10.0, continuous_update=False, description='bandwidth'
```

Usando validación cruzada para encontrar el h óptimo

[295]:
```
# use grid search cross-validation to optimize the bandwidth
params = {'bandwidth': np.logspace(-1, 1, 20)}
grid = GridSearchCV(KernelDensity(), params)
grid.fit(data)

print("best bandwidth: {0}".format(grid.best_estimator_.bandwidth))
# use the best estimator to compute the kernel density estimate
kde = grid.best_estimator_

# muestrea 44 nuevos digitos
new_data = kde.sample(44, random_state=0)
# turn data into a 4x11 grid
new_data = new_data.reshape((4, 11, -1))
real_data = digits.data[:44].reshape((4, 11, -1))
```

```
best bandwidth: 1.8329807108324356
```

[296]:
```
# plot real digits and resampled digits
fig, ax = plt.subplots(9, 11, subplot_kw=dict(xticks=[], yticks=[]))
for j in range(11):
    ax[4, j].set_visible(False)
    for i in range(4):
        im = ax[i, j].imshow(real_data[i, j].reshape((8, 8)),
                             cmap=plt.cm.binary, interpolation='nearest')
        im.set_clim(0, 16)
        im = ax[i + 5, j].imshow(new_data[i, j].reshape((8, 8)),
                                 cmap=plt.cm.binary, interpolation='nearest')
        im.set_clim(0, 16)

ax[0, 5].set_title('Selection from the input data')
ax[5, 5].set_title('"New" digits drawn from the kernel density model')

plt.show()
```


Selection from the input data
"New" digits drawn from the kernel density model