Tema 7. Intervalos de confianza y contrastes de hipótesis basados en remuestreos

basado en

B. Efron, R. Tibshirani (1993). An Introduction to the bootstrap.O. Kirchkamp (2019). Resampling methods.

Curso 2022/2023

Introducción

- Los errores estándar se usan a menudo para calcular intervalos de confianza aproximados para los parámetros que se estudian.
- ▶ Dado un estimador $\hat{\theta}$ y un error estándar \hat{se} , el intervalo de confianza al 95 % habitual es

$$\hat{ heta} \pm 1,96 \cdot \widehat{ ext{se}}$$

donde $z_{0,025} = 1,96$ procede de una distribución normal estándar.

► En el campo de los intervalos de confianza existen diferentes técnicas bootstrap y es un área de desarrollo teórico en evolución constante.



Introducción

- Supongamos que los datos $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ proceden de una distribución desconocida F.
- Si el tamaño muestral n es grande la distribución de $\hat{\theta}$ converge a una normal de media θ y varianza \hat{se}^2 , es decir

$$rac{\hat{ heta}- heta}{\widehat{se}}\sim extsf{N}(0,1)$$

 \blacktriangleright De este modo, se obtiene un intervalo de confianza estándar con probabilidad de recubrimiento igual a 1 - α

$$\left[\hat{\theta}-z_{1-\frac{\alpha}{2}}\widehat{se};\hat{\theta}-z_{\frac{\alpha}{2}}\widehat{se}\right]$$

donde z_{α} es el percentil 100α -ésimo de una distribución normal.

Introducción

- La propiedad de recubrimiento implica que aproximadamente en el $(1-\alpha)\cdot 100\,\%$ de las ocasiones este intervalo contiene el verdadero valor de θ .
- ▶ El bootstrap se puede usar para mejorar los intervalos de confianza; de hecho, cuando *n* es muy grande los intervalos bootstrap y los aproximados convergen a los mismos valores.
- Se puede calcular el estimador *plug-in* $(\hat{\theta} = t(\hat{F}))$ del parámetro de interés $\theta = t(F)$ y, a su vez, un error estándar \hat{se} basado en un método bootstrap o en un método *jackknife*.

- Se podría usar un enfoque exacto para los intervalos de confianza:
 - (I) Funciona incluso con muestras pequeñas.
 - (II) Pero requiere el conocimiento de la verdadera distribución.
 - (III) Para aplicarse a veces hay que hacer transformaciones de los datos.
- En el caso del ejemplo de los aparatos de aire acondicionado, si el número de fallos sigue una distribución de Poisson, entonces los tiempos entre fallos siguen una distribución exponencial.

Supongamos que la función de densidad es

$$f(x;\lambda) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x} & x \ge 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

Para estimar λ se puede usar el estimador de máxima verosimilitud (MLE):

$$\hat{\lambda} = \frac{n}{\sum_{i} x_{i}} = \frac{1}{\overline{x}}$$

► Al asumir una distribución exponencial, se puede calcular el intervalo de confianza exacto para el parámetro (o para la media). Ver:

en.wikipedia.org/wiki/Exponential_distribution

$$IC_{\frac{1}{\lambda}} = \left[\frac{\bar{x} \cdot 2n}{\chi_{2n,1-\frac{\alpha}{2}}^2}; \frac{\bar{x} \cdot 2n}{\chi_{2n,\frac{\alpha}{2}}^2} \right]$$

donde $\chi^2_{n,\alpha}$ es el percentil 100α -ésimo de una distribución χ^2_n .

▶ De este modo se obtiene un intervalo igual a

[1] 65.89765 209.17415

Aproximación a la normal

- ► La aproximación a la normal se puede hacer cuando la muestra es grande.
- Así, la media muestral se distribuye asintóticamente como una normal aplicando el TCL (Teorema Central del Límite).
- Aproximación normal basada en estimadores paramétricos de σ :

```
confint(lm(hours ~ 1, data=aircondit))

2.5 % 97.5 %

(Intercept) 21.52561 194.6411
```

Intervalos t de Student

- Una manera de mejorar los intervalos asintóticos, cuando las muestras son pequeñas, es usar intervalos t de Student.
- ► En 1908 Gosset (the *Student*) calculó la distribución de:

$$t = \frac{\hat{\theta} - \theta}{\widehat{se}} \sim t_{n-1}$$

Mediante esta aproximación el intervalo queda como

$$\left[\hat{\theta} - t_{n-1,1-\alpha/2} \cdot \widehat{se} ; \hat{\theta} - t_{n-1,\alpha/2} \cdot \widehat{se}\right]$$

donde $t_{n-1,\alpha}$ es el percentil α de una distribución t de Student.

- Pero no tiene en cuenta el ajuste necesario de los intervalos de confianza cuando aparece asimetría.
- Se puede mejorar esta aproximación mediante los intervalos bootstrap t.

Intervalos bootstrap t

- Usando el bootstrap se pueden obtener intervalos ajustados sin necesidad de asumir normalidad en los datos.
- ► Los intervalos que se construyen reciben el nombre de aproximación bootstrap-t.
- ► En este método se calcula una tabla de cuantiles de *t* directamente a partir de los datos que se tienen.
- Esta tabla se usa entonces para construir intervalos de confianza de la misma manera que en el caso de los intervalos clásicos.
- ► La tabla de valores remuestreados se construye generando B muestras bootstrap y luego calculando la versión bootstrap del estadístico t para cada uno de ellos.

Intervalos bootstrap t

► El método consiste en generar B muestras bootstrap $\mathbf{x}^{*1}, \mathbf{x}^{*2}, \dots, \mathbf{x}^{*B}$. A continuación, para cada una de ellas se calcula

$$Z^*(b) = rac{\hat{ heta}^*(b) - \hat{ heta}}{\widehat{ ext{se}}^*(b)}$$

- ▶ donde $\hat{\theta}^*(b) = s(\mathbf{x}^{*b})$ es el valor de $\hat{\theta}$ para la muestra bootstrap \mathbf{x}^{*b} y $\hat{se}^*(b)$ es el valor estimado del error estándar de $\hat{\theta}^*$ para la muestra bootstrap \mathbf{x}^{*b} .
- ightharpoonup El α -esimo percentil de $Z^*(b)$ se estima mediante el valor \hat{t}_{α} tal que

$$\frac{\#\left\{Z^*(b) \le \hat{t}_{\alpha}\right\}}{B} = \alpha$$

Intervalos bootstrap t

- Por ejemplo, si B=1000 el estimador del punto 5 % es el 50-esimo valor mayor de los $Z^*(b)$ ordenados y el estimador del punto 95 % es el 950-esimo valor mayor de los $Z^*(b)$ ordenados.
- ▶ De este modo, el estimador bootstrap-t que queda es

$$\left[\hat{\theta} - \hat{t}_{1-\alpha/2} \cdot \widehat{se}; \ \hat{\theta} - \hat{t}_{\alpha/2} \cdot \widehat{se}\right]$$

- Es necesario considerar un número de réplicas B mayor que en el caso del cálculo de los errores estándar bootstrap.
- Por otro lado, los percentiles bootstrap-t pueden diferir bastante de los percentiles t de Student habituales.

- Se puede observar que se necesitan extraer muchas muestras bootstrap para obtener unos resultados ajustados.
- Si comparamos ahora los cuantiles de la distribución original t de Student con los cuantiles bootstrap se obtienen resultados muy diferentes.

```
alfa = 0.05
(extremos = quantile(bT, c(1-alfa/2, alfa/2)))

2.5% 97.5%
1.492036 -4.688775
```

(t.standard = qt(c(alfa/2,1-alfa/2),N-1))

[1] -2.200985 2.200985

Características de los intervalos bootstrap-t

- Los valores de la t de Student o de la normal son simétricos alrededor del cero. De este modo se obtienen intervalos simétricos alrededor del estimador del parámetro $\hat{\theta}$.
- Por el contrario, los percentiles bootstrap-t pueden ser asimétricos con respeto al estimador, lo que lleva a obtener intervalos que son más largos o cortos a la derecha o la izquierda.
- Esta asimetría representa una mejora en el recubrimiento que tienen estos intervalos.
- ► El procedimiento bootstrap-t es una buena opción particularmente en estadísticos de localización como la media muestral, la mediana o los percentiles muestrales.

Desventajas de los intervalos bootstrap-t

- Pero hay problemas computacionales y de interpretación en los intervalos bootstrap-t.
- ▶ En el denominador del estadístico $Z^*(b)$ se necesita conocer $\widehat{se}^*(b)$, es decir, la desviación estándar de $\widehat{\theta}^*$ para cada muestra bootstrap \mathbf{x}^{*b} .
- En el caso de la media, existe una expresión explícita para calcularlo, pero para muchos estadísticos no se tiene una expresión formal para ello.
- La única opción sería calcular un estimador bootstrap del error estándar para cada muestra bootstrap lo cual no es muy operativo.

Desventajas de los intervalos bootstrap-t

- Otro problema que se presenta en los intervalos bootstrap-t es que se puede comportar de manera errática con muestras pequeñas.
- También los intervalos bootstrap-t no son invariantes cuando se aplican transformaciones al parámetro original que se estima.
- ightharpoonup A veces, interesa transformar los datos para encontrar mejores estimadores de θ . Por ejemplo, cambiando la escala de las observaciones.
- Pero a menudo no se sabe cuál es la mejor transformación para aplicar a los datos.

Intervalos básicos

- Otra opción para intervalos bootstrap, son los intervalos básicos
- \blacktriangleright Si se asume que $\hat{\theta} \theta$ se puede aproximar o tiene la misma distribución que $\hat{\theta}^* - \hat{\theta}$, entonces, el intervalo básico se define como

$$IC_{bas} = \left[2\hat{\theta} - \hat{\theta}_{1-\frac{\alpha}{2}}^*; \ 2\hat{\theta} - \hat{\theta}_{\frac{\alpha}{2}}^*\right]$$

- Propiedades de los intervalos básicos:
 - (I) No son invariantes mediante transformaciones.
 - (II) Corrigen el sesgo siempre que $\hat{\theta}-\theta$ tenga la misma distribución que $\hat{\theta}^* - \hat{\theta}$

- Se pueden considerar otro tipo de intervalos basados en los percentiles.
- ▶ Supongamos que se obtiene una muestra \mathbf{x}^* a partir de $\hat{P} \to \mathbf{x}^*$ y se calculan luego los estadísticos $\hat{\theta}^* = s(\mathbf{x}^*)$.
- ▶ Si se denomina \hat{G} la función de distribución acumulada de $\hat{\theta}^*$, entonces, el *intervalo percentil* de nivel $1-\alpha$ se define como los percentiles $\frac{\alpha}{2}$ y $1-\frac{\alpha}{2}$ de \hat{G} :

$$\left[\hat{\theta}_{\text{\%low}};\;\hat{\theta}_{\text{\%up}}\right] = \left[\hat{G}^{-1}\left(\frac{\alpha}{2}\right);\;\hat{G}^{-1}\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)\right]$$

▶ Como por definición $\hat{G}^{-1}(\alpha) = \hat{\theta}^*_{(\alpha)}$ se puede reescribir también el intervalo como

$$\left[\hat{\theta}_{\text{\%low}};\ \hat{\theta}_{\text{\%up}}\right] = \left[\hat{\theta}_{\left(\frac{\alpha}{2}\right)}^{*};\ \hat{\theta}_{\left(1-\frac{\alpha}{2}\right)}^{*}\right]$$

- ► La expresión anterior se refiere a una situación ideal donde hay infinitas réplicas bootstrap. En la práctica se toma un número finito B de ellas.
- Se generan B conjuntos de datos bootstrap independientes $\mathbf{x}^{*1}, \mathbf{x}^{*2}, \dots, \mathbf{x}^{*B}$ y se calculan los respectivos estimadores $\hat{\theta}^*(b) = s(\mathbf{x}^{*b})$, donde $b = 1, \dots, B$.

- ► Se denomina como $\hat{\theta}_{B(\alpha)}^*$ el precentil α -esimo de los valores $\hat{\theta}^*(b)$, es decir, el $B \cdot \alpha$ -esimo valor en la lista ordenada de las B réplicas de $\hat{\theta}^*$.
- Por ejemplo, si B=2000 y $\alpha=0.05$ entonces $\hat{\theta}_{B(\alpha)}^*$ es el valor 100-esimo en la lista ordenada de réplicas.
- ▶ Del mismo modo, se razonaría con $\hat{\theta}_{B(1-\alpha)}^*$, el precentil $1-\alpha$ -esimo de los valores.

ightharpoonup De este modo, el intervalo percentil $1-\alpha$ se define como

$$\left[\hat{\theta}_{\text{\%low}};~\hat{\theta}_{\text{\%up}}\right] \approx \left[\hat{\theta}_{B(\frac{\alpha}{2})}^{*};~\hat{\theta}_{B(1-\frac{\alpha}{2})}^{*}\right]$$

Si la distribución de $\hat{\theta}^*$ es aproximadamente normal, entonces los intervalos precentil y normal estándar coinciden.

```
2.5% 97.5%
48.6625 190.7583
```

- ▶ Para mejorar los intervalos de confianza es necesario realizar a veces transformaciones distintas a la clásica del logaritmo.
- ► El método del percentil permite incorporar de manera automática dicho tipo de transformaciones.
- ► El siguiente lema formaliza el hecho de que el método del percentil siempre *descubre* cuál es la transformación correcta.

Lema del intervalo del percentil: Supongamos que existe una función o transformación m del parámetro tal que convierte en normal a la distribución de $\hat{\theta}$, es decir $\hat{\phi} = m(\hat{\theta})$

$$\hat{\phi} \sim N(\phi, c^2)$$

con una desviación estándar dada c.

▶ Entonces el intervalo del percentil basado en $\hat{\theta}$ se obtiene como la transformación inversa

$$\left[m^{-1}\left(\hat{\phi}-z_{1-\alpha}\cdot c\right);\ m^{-1}\left(\hat{\phi}-z_{\alpha}\cdot c\right)\right]$$

- Supongamos un ejemplo donde se genera una muestra de tamaño 10 de una distribución normal estándar.
- ▶ El parámetro de interés que se trata de estimar es $\theta = e^{\mu}$ donde μ es la media poblacional.
- ▶ El verdadero valor de θ es $e^0 = 1$ y el estimador muestral es $\hat{\theta} = e^{\overline{x}}$.
- Si se generan muestras bootstrap $\hat{\theta}^*$ se obtiene una distribución bastante asimétrica y los intervalos percentil al 95 % resultan ser

$$\left[\hat{\theta}_{\text{%low}};\ \hat{\theta}_{\text{%up}}\right] = [0,75;\ 2,07]$$

Si se calculan los intervalos estándar normales basados en un error estándar $\widehat{se}=0.34$, se obtiene $1.25\pm1.96\cdot0.34=[0.59;\ 1.92]$ que son muy diferentes a los anteriores.

- Sin embargo esta aproximación no es muy buena dado que la distribución del estadístico no es normal.
- Si se toma la transformación logaritmo sobre los datos y se considera el parámetro $\mu = \log(\theta)$ entonces se obtiene un intervalo estándar normal igual a [-0.28; 0.73]
- La distribución de los datos transformados es más simétrica y el intervalo estándar normal es más ajustado.
- Si se toma el antilogaritmo de los extremos de este intervalo, se obtiene [0,76; 2,08] que es casi idéntico al obtenido mediante el percentil bootstrap.
- ► Es decir, el intervalo percentil encuentra de manera automática la transformación adecuada para los datos.

- Los intervalos bootstrap-t y el percentil pueden conducir a estimaciones del intervalo de confianza algo erráticas, especialmente el intervalo percentil cuando el estimador es sesgado respecto al parámetro cuyo intervalo de confianza queremos aproximar.
- ▶ Se puede considerar una version mejorada del intervalo percentil llamada BCa, abreviatura que procede de sesgo-corregido (bias-corrected) y acelerado (accelerated).
- ► En la determination del intervalo BCa utilizaremos dos cantidades, \hat{z}_0 y \hat{a} .
- La primera, \hat{z}_0 , se introduce para corregir el sesgo del estimador $\hat{\theta}$.

 \triangleright \hat{z}_{\cap} se define como

$$\hat{z}_0 = \Phi^{-1} \left(rac{\# \left\{ \hat{ heta}^*(b) < \hat{ heta}
ight\}}{B}
ight)$$

- ▶ Representa el sesgo mediano de la estimation dada por las *B* réplicas bootstrap del estimador.
- Es decir, la discrepancia entre la mediana de dicha distribution de frecuencias y $\hat{\theta}$, en unidades normales.
- \triangleright Obtenemos el valor $\hat{z}_0 = 0$, cuando exactamente la mitad de las observaciones son menores que $\hat{\theta}$.

▶ La segunda cantidad, \hat{a} , denominada *aceleración*, corrige para el caso en que el error estándar $se(\hat{\theta})$ no sea constante, y se define en términos de los valores *jackknife*, como

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\hat{\theta}_{(\cdot)} - \hat{\theta}_{(i)}\right)^{3}}{6 \left[\sum_{i=1}^{n} \left(\hat{\theta}_{(\cdot)} - \hat{\theta}_{(i)}\right)^{2}\right]^{3/2}}$$

lacktriangle donde $\hat{ heta}_{(i)}$ es la *i*-esima réplica *jackknife* del estimador tal que

$$\hat{\theta}_{(i)} = s(\mathbf{x}_{(i)})
\hat{\theta}_{(\cdot)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \hat{\theta}_{(i)}$$

▶ El intervalo de sesgo-corregido y acelerado (intervalo BCa) de coeficiente de confianza $1-\alpha$ se define igual que el intervalo percentil con unos valores particulares α_1 y α_2

$$\left[\hat{\theta}_{\alpha_1}^*;\ \hat{\theta}_{\alpha_2}^*\right]$$

tal que

$$\alpha_{1} = \Phi \left(\hat{z}_{0} + \frac{\hat{z}_{0} + z_{1-\frac{\alpha}{2}}}{1 - \hat{a} \left(\hat{z}_{0} + z_{1-\frac{\alpha}{2}} \right)} \right)$$

$$\alpha_{2} = \Phi \left(\hat{z}_{0} + \frac{\hat{z}_{0} + z_{\frac{\alpha}{2}}}{1 - \hat{a} \left(\hat{z}_{0} + z_{\frac{\alpha}{2}} \right)} \right)$$

▶ siendo $z_{\frac{\alpha}{2}}$ y $z_{1-\frac{\alpha}{2}}$ los cuantiles habituales de la normal estándar y Φ la función de distribución de una normal estándar.

► Se puede observar que si $\hat{z}_0 = \hat{a} = 0$ queda

$$\alpha_1 = \Phi(z_{1-\frac{\alpha}{2}}) = \frac{\alpha}{2}$$

 $\alpha_2 = \Phi(z_{\frac{\alpha}{2}}) = 1 - \frac{\alpha}{2}$

de forma que el intervalo BCa coincide con el intervalo percentil.

- ▶ El valor de \hat{z}_0 translada el intervalo a la derecha o la izquierda y \hat{a} hace que el intervalo sea más ancho o más estrecho.
- ▶ En las aplicaciones de este intervalo se recomienda utilizar, al menos B = 1000 muestras bootstrap.
- ► Al igual que el intervalo percentil, el *BCa* también *adivina* las transformaciones del parámetro.

Contrastes de hipótesis Bootstrap

- ► Contraste de hipótesis de dos muestras bootstrap:
 - (I) Se eligen B submuestras independientes \mathbf{x}' e \mathbf{y}' tomadas CON reemplazamiento de la distribución conjunta (\mathbf{x}, \mathbf{y}) .
 - (II) Se calcula $\widehat{\theta}^*(b)$ para cada muestra.
 - (III) se calcula el nivel de significación alcanzado (ASL) (equivalente al *p-valor*)

$$ASL = \frac{\#\left\{\widehat{\theta}^*(b) > \widehat{\theta}\right\}}{B}$$

Contrastes de hipótesis BCa

- ► Los intervalos *BCa* resultan ser bastante eficientes para calcular intervalos de confianza.
- De este modo, la mejor opción es adaptarlos al caso de los contrastes de hipótesis.
- Se trata de calcular el valor de ASL a partir de intervalos de confianza para una probabilidad de recubrimiento cualquiera α.
- Se tiene que encontrar un nivel α tal que los extremos superior e inferior del intervalo de confianza coincidan con el α_1 o el α_2 observados.

Contrastes de hipótesis BCa

► Se tenía que los intervalos *BCa* se definían como

$$\textit{BCa} = \left[\widehat{\theta}_{(\alpha_1)}^*; \ \widehat{\theta}_{(\alpha_2)}^*\right]$$

con

$$\alpha_2 = \Phi\left(\widehat{z}_0 + \frac{\widehat{z}_0 + z_{\frac{\alpha}{2}}}{1 - \widehat{a}\left(\widehat{z}_0 + z_{\frac{\alpha}{2}}\right)}\right)$$

▶ Si al hacer los remuestreos se obtiene el valor α_2 correspondiente al estadístico observado $\widehat{\theta}$, entonces despejando el valor de $z_{\alpha/2}$ se obtiene que

$$ASL_{BCa} = \Phi\left(\frac{\Phi^{-1}(\alpha_2) - \widehat{z}_0}{1 - \widehat{a}(\Phi^{-1}(\alpha_2) - \widehat{z}_0)} - \widehat{z}_0\right)$$

- La varianza de los estimadores bootstrap tiene dos causas o fuentes de variación:
 - (I) Una procede del muestreo aleatorio simple de tamaño *n* de la población cuyo parámetro queremos estimar.
 - (II) La otra procede del remuestreo bootstrap de tamaño B.
- Se trata de diseñar un método para estimar la varianza de los estimadores bootstrap, que se denomina jackknife-after-bootstrap.
- Se basa en utilizar aproximaciones jackknife en la estimación de la varianza de un estimador bootstrap.

- ► Tomamos el ejemplo de la estimación de $Var(\widehat{se}_B)$, la varianza del estimador bootstrap del error estándar de un estimador $\hat{\theta}$.
- ▶ El método *jackknife-after-bootstrap* consiste en eliminar primero uno de los *i* valores muestrales, i = 1, ..., n y luego recalcular \widehat{se}_B con las muestras bootstrap obtenidas, denominando a este valor $\widehat{se}_{B(i)}$.
- ► El jackknife-after-bootstrap se define como

$$Var_{jack}(\widehat{se}_B) = \frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\widehat{se}_{B(i)} - \widehat{se}_{B(\cdot)})^2$$

donde

$$\widehat{se}_{B(\cdot)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \widehat{se}_{B(i)}$$

- Este método presenta la dificultad del cálculo de seg(i), ya que éste requiere un conjunto de muestras completamente nuevas para cada i.
- No obstante, podemos evitar este exceso de cálculo de la siguiente manera.
- Para cada dato x_i de los valores observados de la muestra, existen muestras bootstrap en las que no aparece x_i , pudiendo utilizarse estas muestras para estimar $\widehat{se}_{B(i)}$
- Por ejemplo, en este caso, lo estimaremos con la desviación típica de las muestras bootstrap que **no** contengan el dato x_i .

 \triangleright Si C_i es el conjunto de muestras bootstrap que **no** contienen a x_i , el cual contiene $B_i \leq B$ elementos, utilizaremos el $\widehat{se}_{B(i)}$ siguiente

$$\widehat{se}_{B(i)} = \sqrt{\frac{1}{B_i} \sum_{b \in C_i} (s(\mathbf{x}^{*b}) - \overline{s}_i)^2}$$

donde

$$\overline{s}_i = \frac{1}{B_i} \sum_{b \in C_i} s(\mathbf{x}^{*b})$$

- Este método se puede aplicar, no solo en la estimación de la varianza del estimador bootstrap del error de muestreo, sino en todos los estimadores bootstrap.
- \triangleright Esto falla si todas las B muestras bootstrap contienen algún dato x_i .
- Así, el número de muestras bootstrap que se debe utilizar es bastante elevado.