Методы современной прикладной статистики
3. Критерии согласия, проверка нормальности, бутстреп

Родионов Игорь Владимирович
vecsell@gmail.com

ШАД

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ – выборка из неизвестного распределения с функцией распределения F.

Рассмотрим гипотезу $H_0 : F = F_0$ против альтернативы $H_1 : F \neq F_0$.

Критерии проверки таких гипотез называются **критериями согласия**.

Критерий Колмогорова-Смирнова

Рассмотрим статистику

$$D_n := \sup_{x\in\mathbb{R}} |\widehat{F}_n(x) - F_0(x)|,$$

где $\widehat{F}_n(x)$ – эмпирическая функция распределения.

Теорема Колмогорова

Если F_0 – непрерывна, то при верной гипотезе H_0

$$P(\sqrt{n}D_n \leq x) \xrightarrow[n\to\infty]{} K(x) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} (-1)^k e^{-2k^2x^2}.$$

Критерий Колмогорова-Смирнова

Таким образом, критерий Колмогорова-Смирнова выглядит так:

$$\textit{если } \sqrt{n}D_n > K_{1-\alpha}, \textit{ то отвергнуть } H_0,$$

где $K_{1-\alpha}$ – $(1-\alpha)$-квантиль функции распределения $K(x)$. Если α близко к 0, то $K_{1-\alpha} \approx \sqrt{-\frac{1}{2}\ln\frac{\alpha}{2}}$.

Критерий хи-квадрат Пирсона

По-прежнему проверяем гипотезу $H_0 : F = F_0$. Пусть P_0 – вероятностная мера (на $\mathbb{R}$), соответствующая функции распределения F_0.

Разобьем $\mathbb{R}$ на k интервалов $\{B_i\}_{i=1}^k$ (обычно k порядка 10) таких, что $nP_0(B_i) \geq 5 \; \forall i$ (B_i выбираются заранее, вне зависимости от данных!). Обозначим $p_i^0 = P_0(B_i)$, $\mu_i = \sharp\{j : X_j \in B_i\}$.

Теорема Карла Пирсона.
Пусть гипотеза H_0 верна, тогда

$$\widehat{\chi} := \sum_{i=1}^{k} \frac{(\mu_i - np_i^0)^2}{np_i^0} \xrightarrow{d} \chi^2_{k-1}, \;\; n \to \infty.$$

Критерий хи-квадрат Пирсона

Критерий хи-квадрат выглядит так

$$\text{если } \widehat{\chi} > u_{1-\alpha}, \text{ то отвергнуть } H_0,$$

где $u_{1-\alpha}$ – $(1-\alpha)$-квантиль распределения χ^2_{k-1}.

Критерий хи-квадрат кажется более грубым, чем критерий Колмогорова, однако он незаменим при работе с дискретными данными и зачастую показывает лучшие результаты, чем критерий Колмогорова, даже в случае "непрерывных" данных.

Другие критерии согласия

- Критерий Смирнова-Крамера-фон Мизеса (ω^2-критерий) со статистикой

$$\omega^2 = \int (\widehat{F}_n(x) - F_0(x))^2 dF_0(x);$$

- Критерий Андерсона-Дарлинга (Ω^2-критерий) со статистикой

$$\Omega^2 = \int \frac{(\widehat{F}_n(x) - F_0(x))^2}{F_0(x)(1 - F_0(x))} dF_0(x);$$

Другие критерии согласия

- Критерий Фроцини

$$\int |\widehat{F}_n(x) - F_0(x)| dF_0(x);$$

- Критерий Купера

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} (\widehat{F}_n(x) - F_0(x)) + \sup_{x \in \mathbb{R}} (F_0(x) - \widehat{F}_n(x));$$

- Критерий Ватсона

$$\int \left(\widehat{F}_n(x) - F_0(x) - \int (\widehat{F}_n(x) - F_0(x)) dF_0(x) \right)^2 dF_0(x).$$

Свойства критериев согласия

- Распределение статистик критериев при верности нулевой гипотезы не зависит от F_0. Действительно, преобразование $Y_i = F_0(X_i)$ переводит случайные величины X_i в равномерно распределенные на $[0, 1]$. Поэтому при верности нулевой гипотезы статистики критериев всегда сходятся к одному и тому же предельному закону.
- Все перечисленные критерии согласия являются состоятельными.

Свойства критериев согласия

- Однако при ложности нулевой гипотезы критерии ведут себя по-разному. К сожалению, не существует критерия, который являлся бы р.н.м. критерием в данной задаче.
- Критерий Андерсона-Дарлинга показывает наилучшие результаты на большом классе распределений.
- Критерий Колмогорова, как правило, не очень хорошо ведет себя на альтернативе, в частности, плохо различает распределения, не совпадающие на хвостах.

Проверка сложных гипотез

Гораздо более значимой с практической точки зрения является задача определения семейства, к которому принадлежит распределение выборки (например, задача проверки нормальности данных).

Но прежде чем проверять данные на принадлежность какому-то семейству распределений, нужно определить наиболее подходящее семейство, чтобы не перебирать критерии вслепую.

Описательная статистика

Первоначальная обработка статистических данных, как правило, осуществляется с помощью методов описательной (дескриптивной) статистики, таких, как гистограмма распределения, Box-plot и QQ-plot.

Построение гистограммы выборки, её Box-plot и QQ-plot нужны для определения примерного (модельного) распределения данных, после чего применяются более точные методы и критерии для проверки адекватности выбранной модели.

Параметры сдвига и масштаба

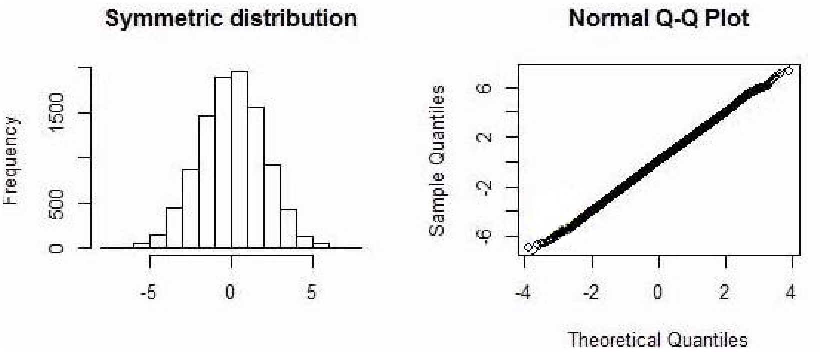
Пусть имеется параметрическое семейство функций распределения $\{F_\theta(x), \theta \in \Theta\}$.

- Параметр θ называется параметром сдвига, если $F_\theta(x) = F_0(x - \theta)$;
- Параметр θ называется параметром масштаба, если $F_\theta(x) = F_1(x/\theta)$;
- Параметр, не являющийся параметром сдвига или масштаба, называется параметром формы.

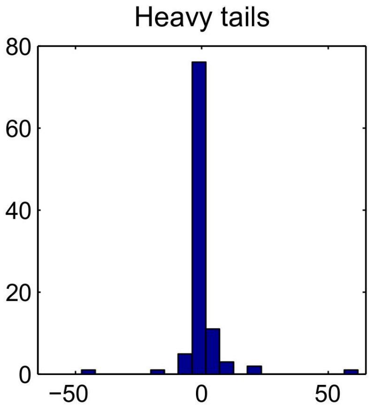
К примеру, для семейства распределений $N(a, \sigma^2)$ параметр a является параметром сдвига, а σ – параметром масштаба, оба параметра бета-распределения являются параметрами формы.

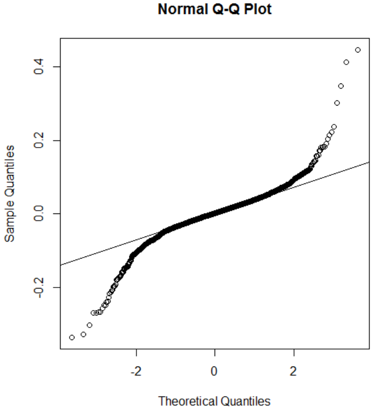
Допустим, мы хотим проверить гипотезу $H_0 : F = F_0\left(\frac{x-a}{\sigma}\right)$ (т.е. гипотеза о принадлежности семейству распределений с параметрами сдвига и масштаба).

QQ-plot – это график, на который нанесены точки $\left(F_0^{-1}\left(\frac{i-0.5}{n}\right), X_{(i)}\right)$. Если точки примерно лежат на одной прямой, то распределение данных близко к F_0 (с точностью до параметров сдвига и масштаба).

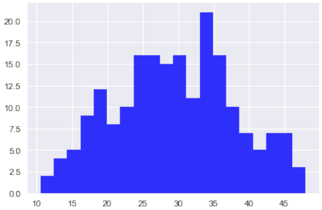


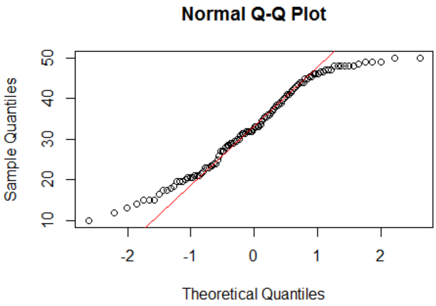
На рисунке: QQ-plot относительно нормального распределения (Normal QQ-plot) для выборки из нормального закона (среднее – 0, дисперсия ≈ 4). Так же QQ-plot может выглядеть для выборки из распределения Стьюдента с большим числом степеней свободы.



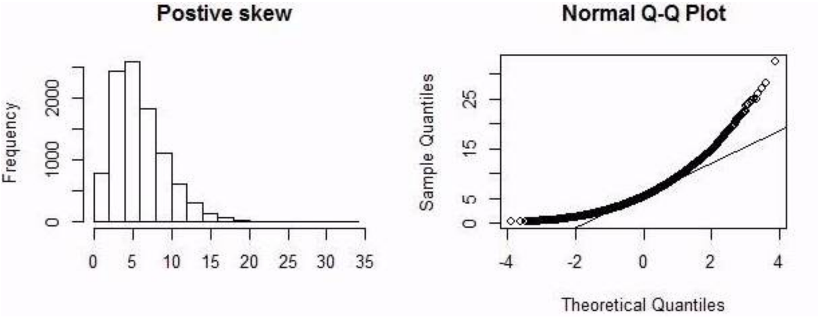


На рисунке: Normal QQ-plot для выборки с тяжелыми (относительно нормального закона) хвостами (heavy tails). Примеры: 2 – *Pareto*, *Laplace*, *St*, *Cauchy* и тд.

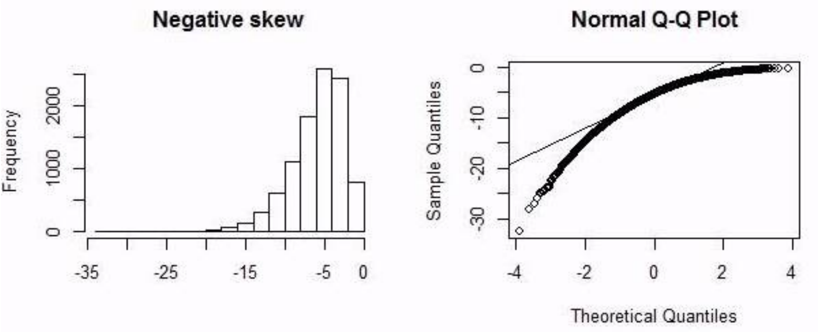




На рисунке: Normal QQ-plot для выборки с легкими (относительно нормального закона) хвостами (light tails). Примеры: распределения с ограниченным носителем.



На рисунке: Normal QQ-plot для выборки из правостороннего распределения (right-skewed). Примеры: *Gamma*, *LN*, *Poisson*, right-skewed normal.



На рисунке: Normal QQ-plot для выборки из левостороннего распределения (left-skewed). Примеры: *Inverse-Gamma*, left-skewed normal.

Почему работает QQ-plot

Объясним, почему точки $\left(F_0^{-1}\left(\frac{i-0.5}{n}\right), X_{(i)}\right)$, $i = 1, \ldots, n$ должны лежать примерно на одной прямой, если $\{X_i\}_{i=1}^n$ – выборка из $F_0\left(\frac{x-a}{\sigma}\right)$.

Пусть $\{Y_i\}_{i=1}^n$ – выборка из $F_0(x)$, тогда по теореме о выборочной квантили

$$Y_{(i)} - F_0^{-1}\left(\frac{i}{n}\right) \xrightarrow{P} 0,\ n \to \infty,$$

т.е. при достаточно больших n $Y_{(i)} \approx F_0^{-1}\left(\frac{i-0.5}{n}\right)$. Но $\frac{X_i-a}{\sigma} \stackrel{d}{=} Y_i$, откуда $\frac{X_{(i)}-a}{\sigma} \stackrel{d}{=} Y_{(i)} \approx F_0^{-1}\left(\frac{i-0.5}{n}\right)$, т.е. точки $\left(F_0^{-1}\left(\frac{i-0.5}{n}\right), X_{(i)}\right)$ должны лежать около прямой $y = bx + a$.

Модификация критериев согласия

Один из методов проверки принадлежности распределения выборки какому-либо семейству распределений заключается в применении критериев согласия.

Пусть семейство функций распределения $\{F(x; a, b)\}$ параметризовано параметрами сдвига и масштаба, т.е. $F(x; a, b) = F_0(\frac{x-a}{b})$, где $F_0(x) = F(x; 0, 1)$.

Пусть $\widehat{a}$ и $\widehat{b}$ – состоятельные оценки параметров a и b соответственно.

Тогда для проверки гипотезы $H_0 : F \in \{F(x; a, b)\}$ можно воспользоваться критерием согласия, где вместо F_0 в статистике критерия нужно подставить $F_0(\frac{x-\widehat{a}}{\widehat{b}})$.

В частности, если для семейства нормальных распределений $\{N(a, \sigma^2)\}$ в качестве критерия согласия взять критерий Колмогорова-Смирнова со статистикой $D_n = \sup_x |\widehat{F}_n(x) - F_0(x)|$, а в качестве оценок параметров a и σ^2 – выборочное среднее и выборочную дисперсию соответственно, то получим **критерий Лиллиефорса** проверки нормальности выборки.

Замечание. Предельные распределения статистик модифицированных критериев согласия при верности нулевой гипотезы могут существенно зависеть не только от вида семейства распределений, но и от вида выбранных оценок параметров.

Таблица квантилей уровня $1 - \alpha$ распределений Лиллиефорса и Колмогорова, при $n > 30$ можно пользоваться ими.

Критические значения $\lambda_{\alpha 0}$ для распределений:	Уровень значимости α			
	0,20	**0,10**	**0,05**	**0,01**
Распределение Колмогорова	1,073	1,224	1,358	1,627
Распределение Лиллиефорса	0,736	0,805	0,886	1,031

Обобщенный критерий хи-квадрат

Обобщенный критерий хи-квадрат позволяет проверять гипотезы общего вида $H_0 : F \in \mathcal{P}_0 = \{P_\theta, \theta \in \Theta\}$, где $\dim(\Theta) = d$, против альтернативы $H_0 : F \notin \mathcal{P}_0$.

Как и ранее, разобьем $\mathbb{R}$ на несколько интервалов $\{B_i\}_{i=1}^k$, $k > d$, и обозначим $\mu_i = \sharp\{j : X_j \in B_i\}$, $p_i(\theta) = P_\theta(B_i)$, потребовав $\forall \theta \in \Theta$ выполнения $p_i(\theta) > c > 0$.

Теорема Фишера.
Пусть Θ – открытое множество в $\mathbb{R}^d$, предположим, что матрица частных производных $\left\|\frac{\partial p_i(\theta)}{\partial \theta_j}\right\|$ имеет ранг d для всех $\theta \in \Theta$. Пусть $\widehat{\theta}$ – ОМП по "выборке" $\mu_1, \ldots, \mu_k$, т.е.

$$\widehat{\theta} = \arg\max_{\theta \in \Theta} \tfrac{n!}{\mu_1! \ldots \mu_k!} \prod_{i=1}^k p_i^{\mu_i}(\theta),$$

или $\widehat{\theta}$ – оценка по минимуму хи-квадрат, т.е.

$$\widehat{\theta} = \arg\min_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^k \tfrac{(\mu_i - np_i(\theta))^2}{np_i(\theta)}.$$

Тогда при условии верности H_0 выполнено

$$\chi(\widehat{\theta}) = \sum_{i=1}^k \frac{(\mu_i - np_i(\widehat{\theta}))^2}{np_i(\widehat{\theta})} \xrightarrow{d} \chi^2_{k-d-1}, n \to \infty.$$

Критерий (типа) Шапиро-Уилка
Проверяется гипотеза $H_0 : F \in \{N(a, \sigma^2)\}$ против альтернативы $H_1 : F \notin \{N(a, \sigma^2)\}$. Статистика критерия

$$W = \frac{\left(\sum_{i=1}^n a_i X_{(i)}\right)^2}{\sum_{i=1}^n (X_i - \overline{X})^2},$$

где $(a_1, \ldots, a_n) = \frac{m^T V^{-1}}{\|m^T V^{-1}\|^2}$, $(m_1, \ldots, m_n)$ – мат. ожидания порядковых статистик выборки размера n из $N(0, 1)$, а V – матрица ковариаций этих порядковых статистик.

При верной гипотезе H_0 статистика W имеет табличное распределение, значения вектора $(a_1, \ldots, a_n)$ также табулированы.

Проверка нормальности

Критерий Харке-Бера тоже используется для проверки выборки на нормальность. Рассмотрим статистику

$$JB = \frac{n}{6}\left((Sk)^2 + \frac{1}{4}(Ku)^2\right),$$

где $Sk = \frac{m_3}{m_2^{3/2}}$, $Ku = \frac{m_4}{m_2^2} - 3$ и $m_j = \frac{1}{n}\sum_i (X_i - \overline{X})^j$ – выборочный центральный момент.

При $n > 2000$ $JB \approx \chi^2(2)$, при меньших n следует искать квантили в таблицах. Модификацией критерия Харке-Бера является довольно точный комбинированный K^2-критерий.

Сравнение критериев проверки нормальности распределения случайных величин

Наименование критерия (раздел)	Характер альтернативного распределения					Ранг
	асимметричное		симметричное		≈ нормальное	
	$\alpha_4 < 3$	$\alpha_4 > 3$	$\alpha_4 < 3$	$\alpha_4 > 3$	$\alpha_4 \approx 3$	
Критерий Шапиро–Уилка (3.2.2.1)	1	1	3	2	2	1
Критерий K^2 (3.2.2.16)	7	8	10	6	4	2
Критерий Дарбина (3.1.2.7)	11	7	7	15	1	3
Критерий Д'Агостино (3.2.2.14)	12	9	4	5	12	4
Критерий α_4 (3.2.2.16)	14	5	2	4	18	5
Критерий Васичека (3.2.2.2)	2	14	8	10	10	6
Критерий Дэвида–Хартли–Пирсона (3.2.2.10)	21	2	1	9	1	7
Критерий χ^2 (3.1.1.1)	9	20	9	8	3	8
Критерий Андерсона–Дарлинга (3.1.2.4)	18	3	5	18	7	9
Критерий Филлибена (3.2.2.5)	3	12	18	1	9	10
Критерий Колмогорова–Смирнова (3.1.2.1)	16	10	6	16	5	11
Критерий Мартинеса–Иглевича (3.2.2.14)	10	16	13	3	15	12
Критерий Лина–Мудхолкара (3.2.2.13)	4	15	12	12	16	13
Критерий α_3 (3.2.2.16)	8	6	21	7	19	14
Критерий Шпигельхальтера (3.2.2.11)	19	13	11	11	8	15
Критерий Саркади (3.2.2.12)	5	18	15	14	13	16
Критерий Смирнова–Крамера–фон Мизеса (3.1.2.2)	17	11	20	17	6	17
Критерий Локка–Спурье (3.2.2.7)	13	4	19	21	17	18
Критерий Оя (3.2.2.8)	20	17	14	13	14	19
Критерий Хегази–Грина (3.2.2.3)	6	19	16	19	21	20
Критерий Муроты–Такеучи (3.2.2.17)	15	21	17	20	20	21

Кобзарь, 3.2.2.19, табл. 80.

Допустим, мы хотим оценить параметр θ с помощью асимптотически нормальной оценки $\widehat{\theta}_n$,

$$\sqrt{n}(\widehat{\theta}_n - \theta) \xrightarrow{d_\theta} N(0, \sigma^2(\theta)), n \to \infty.$$

Но реальная дисперсия $\widehat{\theta}_n$ при фиксированном n может сильно отличаться от $\sigma^2(\theta)/n$, т.е. вероятность покрытия асимптотическим доверительным интервалом истинного значения θ может быть гораздо ниже заявленной.

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ – выборка из неизвестной ф.р. F. Тогда возьмем в качестве нового выборочного пространства значения $(X_1, \ldots, X_n)$ и положим каждому значению вероятность $1/n$.

Полученное дискретное распределение будет иметь функцию распределения $\widehat{F}_n$. Бутстреп – это семплирование одной или нескольких выборок из $\widehat{F}_n$. Поскольку $\widehat{F}_n$ при больших n близка к F, то бутстрепная выборка будет похожа на выборку из ф.р. F.

Бутстрепная оценка дисперсии

Пусть имеется некоторая статистика $T_n(X) = T_n(X_1, \ldots, X_n)$, найдем оценку её дисперсии с помощью бутстрепа.

Семплируем m бутстрепных выборок $\{X^*_{i,1}\}_{i=1}^n, \ldots, \{X^*_{i,m}\}_{i=1}^n$ из совокупности $\{X_1, \ldots, X_n\}$ и найдем $T^*_{n,j} = T_n(X^*_{1,j}, \ldots, X^*_{n,j})$ $\forall j \in \{1 \ldots m\}$.

Тогда оценка методом бутстрепа дисперсии статистики $T_n(X)$ будет равна

$$v_{boot}(T) = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} \left(T^*_{n,j} - \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} T^*_{n,j} \right)^2.$$

Предположим, что $T_n(X)$ оценивает некий параметр θ, также предположим, что распределение $T_n(X)$ близко к нормальному.

Тогда можно предложить следующий доверительный интервал уровня доверия $1-\alpha$ для параметра θ :

$$\left(T_n + z_{\alpha/2}\sqrt{v_{boot}(T)}, T_n + z_{1-\alpha/2}\sqrt{v_{boot}(T)}\right),$$

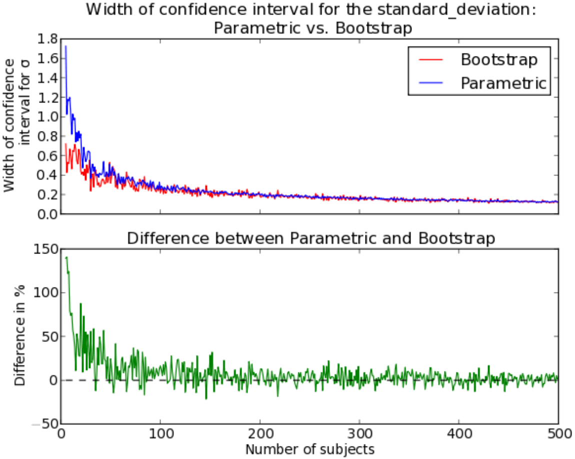
где z_γ – γ-квантиль $N(0,1)$.

Заметим, что поскольку $T_n(X)$ является оценкой для θ, а $T^*_{n,1}$ – для $T_n(X)$, то $T^*_{n,1} - T_n$ оценивает $T_n - \theta$.

Образуем вариационный ряд совокупности $\{T^*_{n,1}, \ldots, T^*_{n,m}\} : T^*_{(1)} \le T^*_{(2)} \ldots \le T^*_{(m)}$.

Тогда с большой вероятностью $T_n(X) - \theta$ лежит в интервале $\left(T^*_{([m\alpha])} - T_n, T^*_{([m(1-\alpha)])} - T_n\right)$, т.е. получаем следующий доверительный интервал для θ

$$\left(2T_n - T^*_{([m(1-\alpha)])}, 2T_n - T^*_{([m\alpha])}\right).$$



Сравнение длин асимптотического и бутстрепного доверительного интервала для оценки стандартного отклонения.

Предшественник бутстрепа – метод складного ножа. Пусть имеется выборка $(X_1, \ldots, X_n)$ и статистика $T_n(X) = T_n(X_1, \ldots, X_n)$. Обозначим

$$\widehat{T}_1 = T_{n-1}(X_2, \ldots, X_n);$$
$$\widehat{T}_2 = T_{n-1}(X_1, X_3, \ldots, X_n); \ \ldots$$
$$\widehat{T}_n = T_{n-1}(X_1, \ldots, X_{n-1}).$$

Если T_n – оценка параметра θ, то для оценки смещения $Bias = T_n - \theta$ можно использовать оценку

$$(n-1)\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widehat{T}_i - T_n\right),$$

Также можно оценить дисперсию T_n следующим образом

$$v_{jack} = \frac{n-1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\widehat{T}_i - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\widehat{T}_i\right)^2.$$

Finita!