

Кроме классической статистики

Что ещё есть интересного за рамками классической статистики? Как можно ценой больших вычислений отказаться от ограничивающих предположений при оценке параметров, проверке гипотез и построении доверительных интервалов? Об этом в обзоре последней лекции.

12.1 Экзотичный доверительный интервал

Наверняка мы всё уже сталкивались с ситуацией, когда мы вычислили по данным какую-то метрику, оценили параметры, но сделали это настолько сложно, что классическая статистика не пробросилась через весь пайплайн. Кроме этого, данных конечное число, больше нам никто не даст, хотя у нас в очень крайнем случае и могут быть ещё силы разметить десяток картинок для классификации. Что делать, если мы хотим узнать больше про полученные оценки: получить доверительный интервал (чтобы понять, насколько устойчива оценка), проверить гипотезу (если мы работаем с нетривиальными метриками в АБ-тестировании), оценить смещение и дисперсию оценки?

Пример 12.1. *Вам, команде аналитиков, задают вопрос: как вы можете быть уверены, что ваш метод случайного леса устойчив к данным? Возможно, если выкинуть или добавить 2-3 наблюдения результат сильно изменится? Есть ли доверительный интервал для ваших оценок? (есть целая область Uncertainty Quantification, которая интересуется подобными задачами)*

Пример 12.2. *С другой стороны, вы получили AUC, точность и полноту. Это у вас средний показатель хороший, вам с данными повезло или всё же если имеющиеся данные поменять, результат останется неплохим? Насколько уверенный результат? Тут тоже поможет доверительный интервал.*

Пример 12.3. *Известная мера риска в финансовой математике – отношение Шарпа (Sharpe ratio)*

$$SR = \frac{E[X]}{\sigma_x} \approx \frac{\bar{X}}{\hat{\sigma}_x} = \widehat{SR},$$

которое может оцениваться, к примеру, в контексте портфелей, где X – доходность. Если X – гауссовские (что неправда в жизни), то оценка \widehat{SR} имеет распределение Стьюдента. А в других случаях?..

Во всех этих случаях мы сталкиваемся с тем, что ничего конкретного не можем сказать про распределение статистик или про распределение данных. Данные, как мы уже замечали, дополнительно получать может быть дорого, поэтому надежды на ЦПТ нужно строить с внимательной оглядкой на количество наблюдений. Кстати, какой типичный размер тестовой выборки вы у себя задаёте на Кагле?..

Но оказывается, что есть способы жить даже в такой ситуации.

12.2 Бутстреп

Бутстреп (bootstrap) можно рассматривать как набор техник, позволяющих искусственно генерировать больше данных из уже существующих, при этом получается распределение, похожее на исходное распределение выборки. С этими данными можно манипулировать, добиваясь нужных для ЦПТ и других великих теорем предположений.

Пример 12.4. Положим, у нас есть выборка из 10 наблюдений X_1, \dots, X_{10} из некоторого распределения F с плотностью. Мы хотели бы оценить среднее, выборочное среднее – наш кандидат:

$$\mathbb{E}[X] \approx \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} X_i.$$

Но вот как построить доверительный интервал для $\mathbb{E}[X]$? Даже ещё проще: как оценить дисперсию $\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} X_i$ при том, что дисперсия X_i неизвестна?

Давайте детальнее рассмотрим в

$$\frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} X_i.$$

Эту сумму можно рассматривать как выборочное среднее, взятое от величин $X_1, \dots, X_{10} \sim F$, как мы привыкли. Но можно посмотреть с другой стороны. Представим себе, что у нас есть дискретная случайная величина, распределённая равномерно с десятью (положим, повторений в данных нет) возможными значениями x_1, \dots, x_{10} (реализация выборки). Тогда наверху написано точное среднее; более того, если рассмотреть $f(X_i)$ вместо X_i это всё ещё будет точным средним. Теорема Гливленко-Кантелли даже формальнее утверждает, что эмпирическая функция распределения \hat{F}_n равномерно сходится к настоящей F при росте n :

$$\sup_{t \in \mathbb{R}} |F(t) - \hat{F}_n(t)| \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty.$$

Неформально говоря (формально говорить сложно), эмпирическое распределение, о котором мы только что говорили, *похоже* на распределение, из которого была взята выборка, а значит, мы можем попробовать использовать это знание, чтобы сгенерировать как можно больше данных и использовать привычную нам ЦПТ. В этом и состоит ключевая

идея бутстрепа.

Важно понять один тонкий момент, который часто упускают из вида: бутстреп НЕ позволяет сделать оценку точнее или доверительный интервал уже; причина простая – для этого нужно больше информации, а значит больше данных об истинном распределении F , а мы умеем семплировать только из \hat{F} . Методы бутстрепа (если грубо) всего лишь из данных из непонятного распределения получают данные из более понятного распределения. Главное назначение бутстрепа – это вообще дать возможность построить доверительный интервал в условиях, когда совершенно не ясно, как его строить.

12.2.1 Перцентильный бутстреп

Простейший и самый универсальный метод бутстрепа – перцентильный или наивный бутстреп. Пусть дана выборка X_1, \dots, X_n , и мы умеем по данным вычислять некоторую статистику $\hat{\theta}$. Для того, чтобы построить доверительный интервал для θ , предлагается такой алгоритм:

1. Сгенерировать n_{boot} бутстреп-выборок: в каждую равновероятной выборкой с возвращением из X_1, \dots, X_n набирается n наблюдений;
2. Для каждой бутстреп-выборки $X_1^{(k)}, \dots, X_n^{(k)}$ вычислить оценку $\hat{\theta}^{(k)}$, отсортировать оценки по возрастанию;
3. В качестве доверительного интервала уровня $1 - \alpha$ задать интервал $(q_{\alpha/2}, q_{1-\alpha/2})$, где q – посчитанные по отсортированному набору оценок перцентили.

Удивительно, но если мы попробуем регенерировать выборку X_1, \dots, X_n и повторить эту процедуру много раз, то мы увидим, что вероятность накрытия интервалом истинного значения θ очень близка к заданной $1 - \alpha$ даже при относительно небольших объёмах выборки. То есть, если выборка более-менее репрезентативна (нет такого, что мы забыли в выборке представить хвост распределения с ощутимой вероятностью), то результат неплохой. Но при этом одним только бутстрепом оценку не уточнить.

Если в общем, то теория бутстрепа говорит, что при стремлении к бесконечности n_{boot} и n доверительный интервал сходится к настоящему. При фиксированном n всё равно остаётся ошибка, порождённая разницей между распределением F и распределением \hat{F} .

12.2.2 Бутстреп t -статистик

Перцентильный бутстреп неявно использует идею симметричности распределения статистик при построении доверительного интервала. Однако это предположение может быть неверно: некоторые метрики в АБ-тестировании, например, скошены в положительную

сторону. Для того, чтобы побороть эту проблему был предложен t -бутстреп.

Предположим, что X_1, \dots, X_n приходит из скошенного распределения, многие метрики в АБ-тестировании оказываются скошенными вправо в силу их специфики. Переход к t -статистикам позволяет скомпенсировать эффект скошенности и лучше работать с несимметричными распределениями, теперь квантили строятся по распределению без эффекта скоса.

1. Вычислить \bar{X} по исходной выборке;
2. Сгенерировать B бутстреп-выборок, по каждой вычислить

$$t_k^* = \frac{\bar{X} - \overline{X^{(k)}}}{\hat{\sigma}(X^{(k)})/\sqrt{n}}.$$

3. Предложить доверительный интервал уровня $1 - \alpha$ как $(\bar{X} + \hat{\sigma}q_{\alpha/2}, \bar{X} + \hat{\sigma}q_{1-\alpha/2})$, где q – перцентили из набора t -статистик.

Но почему только выборочное среднее? Можно построить такую процедуру для общей оценки $\hat{\theta}$, нужно поменять определение t -статистики

$$t_k^* = \frac{\hat{\theta} - \hat{\theta}_k^*}{\hat{\sigma}(\hat{\theta}_k^*)},$$

и доверительный интервал задать как

$$(\hat{\theta} + \sigma(\hat{\theta})q_{\alpha/2}, \hat{\theta} + \sigma(\hat{\theta})q_{1-\alpha/2})$$

но тут понадобится как-то вычислить точно или аппроксимировать дисперсию бутстреп-оценки и оценки по исходным данным. Это можно сделать в том числе ещё одним вложенным бутстрепом.

12.3 Проверка гипотез с помощью бутстрепа

До сих пор мы строили доверительные интервалы, но, как мы помним, они имеют прямое отношение к проверке гипотез. Как можно использовать бутстреп для этой задачи? Давайте для конкретики обсудим критерий для проверки гипотезы о равенстве средних в двух выборках, которая часто возникает в контексте АБ-тестирования.

Определимся, что нам нужно от статистического критерия: нужно уметь считать p -value. Нам даны выборки X_1, \dots, X_n и Y_1, \dots, Y_m , если сложим в одну выборку, то получим Z_1, \dots, Z_{n+m} . Мы проверяем гипотезу

$$H_0 : \mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[Y], \quad H_A : \mathbb{E}[X] > \mathbb{E}[Y].$$

Положим, гипотеза верна, нам нужно вычислить наименьший уровень значимости, при котором гипотеза отвергается (это и есть p -value) при данном значении статистики. Нам нужно, таким образом, предложить статистику, и посчитать пороговую вероятность ошибки. Один из классических подходов, предложенный Эфроном, состоит в следующем.

1. Тестовая статистика

$$T = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{\sqrt{\hat{\sigma}_x^2/n + \hat{\sigma}_y^2/m}}.$$

2. Модифицируем данные, чтобы сопоставить смещения: $X' = X - \bar{X} + \bar{Z}$, $Y' = Y - \bar{Y} + \bar{Z}$.

3. Сгенерировать n_{boot} бутстреп-выборок $X^{(k)}$ и $Y^{(k)}$ и вычислить по каждой паре выборок $X^{(k)}$, $Y^{(k)}$ статистику

$$T_k^* = \frac{\bar{X}^{*(k)} - \bar{Y}^{*(k)}}{\sqrt{\hat{\sigma}_{x^{(k)}}^2/n + \hat{\sigma}_{y^{(k)}}^2/m}}.$$

4. Оценить p -value из определения как

$$p = \frac{\sum_{i=1}^{n_{boot}} I(T_i^* \geq T)}{n_{boot}}.$$

Для двустороннего теста в последнем пункте нужно оценивать

$$p = 2 \min (\mathbb{P}(T^* \geq T), \mathbb{P}(T^* \leq T)),$$

но в остальном процедура та же.

Если мы откажемся от p -value, то в случае двусторонней альтернативы здесь транслируется та же идея с доверительными интервалами. Мы оцениваем доверительный интервал уровня $1 - \alpha$ с помощью бутстрепа, а дальше, если статистика не попадает в интервал, то гипотеза отвергается на уровне значимости α .

Литература

- [1] T. W. Anderson and D. A. Darling. Asymptotic Theory of Certain "Goodness of Fit"Criteria Based on Stochastic Processes. *The Annals of Mathematical Statistics*, 23(2):193 – 212, 1952.
- [2] Peter C Austin, Muhammad M Mamdani, David N Juurlink, and Janet E Hux. Testing multiple statistical hypotheses resulted in spurious associations: a study of astrological signs and health. *J Clin Epidemiol*, 59(9):964–969, July 2006.
- [3] Erika Cule, Paolo Vineis, and Maria De Iorio. Significance testing in ridge regression for genetic data. *BMC Bioinformatics*, 12(1):372, Sep 2011.
- [4] A. P. Dempster, N. M. Laird, and D. B. Rubin. Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 39(1):1–38, 1977.
- [5] R. E. Kalman. A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems. *Journal of Basic Engineering*, 82(1):35–45, 03 1960.
- [6] S.J. Levitt, S.D. Dubner. *Freakonomics*. NY: Harper Trophy, 2006.
- [7] Richard Lockhart, Jonathan Taylor, Ryan J. Tibshirani, and Robert Tibshirani. A significance test for the lasso. *The Annals of Statistics*, 42(2):413–468, 2014.
- [8] J. Scott Long and Laurie H. Ervin. Using heteroscedasticity consistent standard errors in the linear regression model. *The American Statistician*, 54(3):217–224, 2000.
- [9] Herbert E Rauch, F Tung, and Charlotte T Striebel. Maximum likelihood estimates of linear dynamic systems. *AIAA journal*, 3(8):1445–1450, 1965.
- [10] O. A. Stepanov. Kalman filtering: Past and present. an outlook from russia. (on the occasion of the 80th birthday of rudolf emil kalman). *Gyroscopy and Navigation*, 2(2):99–110, Apr 2011.
- [11] R. L. Stratonovich. Conditional markov processes. *Theory of Probability & Its Applications*, 5(2):156–178, 1960.
- [12] Halbert White. A heteroskedasticity-consistent covariance matrix estimator and a direct test for heteroskedasticity. *Econometrica*, 48(4):817–838, 1980.
- [13] Платонов Е.Н. Горяинова Е.Р., Панков А.Р. *Прикладные методы анализа статистических данных*. Изд. дом Высшей школы экономики, 2012.

- [14] Ю.М. Кельберт, М.Я. Сухов. *Вероятность и статистика в примерах и задачах. Т.3: теория информации и кодирования*. М.: МЦНМО, 2013.
- [15] Р.Л. Стратонович. *Условные марковские процессы и их применение к теории оптимального управления*. Московский государственный университет, 1966.
- [16] А.Н. Ширяев. *Основы стохастической финансовой математики*. МЦНМО, 2016.