EST-24107: Simulación

Profesor: Alfredo Garbuno Iñigo — Primavera, 2022 — Bootstrap paramétrico.

Objetivo: En esta sección del curso veremos cómo incorporar mayores supuestos en el modelo de inferencia. Esto con el objetivo de mejorar la estimación por intervalos bootstrap. Es decir, para poder reducir la amplitud de los intervalos de confianza. Estudiaremos algunos puntos a considerar que pueden ser vistas como fortalezas y debilidades del método.

Lectura recomendada: Capítulo 6 de Efron and Tibshirani [2]. Sección 13.2 de Chihara and Hesterberg [1].

1. BOOTSTRAP PARAMÉTRICO

- Supongamos que tenemos una muestra $X_1, \ldots, X_N \stackrel{\text{iid}}{\sim} \mathbb{P}(x; \theta^*)$. Es decir, tenemos un modelo paramétrico que da lugar a nuestros datos.
- En este tipo de problemas de inferencia suponemos la familia paramétrica

$$\mathcal{P}_{\Theta} = \{ \mathbb{P}(\cdot; \theta) : \theta \in \Theta \} , \tag{1}$$

donde Θ denota el **espacio parametral** (los posibles valores de los parámetros de un modelo).

■ En esta tarea no conocemos el valor específico de θ^* . Por lo tanto, lo tenemos que estimar. Usualmente a través de resolver un problema de optimización

$$\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \prod_{i=1}^{N} \mathbb{P}(X_i; \theta).$$
 (2)

cuva solución llamamos estimador de máxima verosimilitud.

 Adicional, nos encantaría poder establecer una cuantificación de la incertidumbre sobre este valor. En particular, reportar

$$\operatorname{ee}\left(\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}}\right) = \left(\mathbb{V}(\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}})\right)^{1/2}.\tag{3}$$

- Para algunos modelos es fácil poder estimarlo, utilizando propiedades asintóticas y/o analíticas de nuestros estimadores (lo ven en el curso de Estadística Matemática).
- Consideremos ejemplos:
 - 1. Modelo Poisson, $X_1, \ldots, X_N \stackrel{\mathsf{iid}}{\sim} \mathsf{Poisson}(\lambda)$.
 - 2. Modelo Bernoulli, $X_1, \dots, X_N \stackrel{\mathsf{iid}}{\sim} \mathsf{Bernoulli}(\theta)$.
 - 3. Modelo uniforme, $X_1, \ldots, X_N \stackrel{\mathsf{iid}}{\sim} \mathsf{U}(0, \theta)$.
 - 4. Modelo normal, $X_1, \ldots, X_N \stackrel{\text{iid}}{\sim} \mathsf{N}(\mu, \sigma^2)$.
- Sin embargo, ¿qué pasa si nuestro estimador no tiene fórmulas cerradas para el cálculo del error estándar? ¿O si nuestro tamaño de muestra no sugiere que los supuestos del TLC se cumplen?

- 1.0.1. Definición [Método bootstrap paramétrico]: El error estándar estimado para $\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}}$ por medio del bootstrap paramétrico se calcula como sigue:
 - 1. Se calcula $\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}}$ para la muestra observada.
 - 2. Se simula una muestra iid de tamaño N de $X_1^{(b)}, \dots, X_N^{(b)} \stackrel{\text{iid}}{\sim} \mathbb{P}(x; \hat{\theta}_{\mathsf{MLE}})$ (muestra boots-
 - 3. Se recalcula el estimador de máxima verosimilitud para la muestra bootstrap, lo cual denotamos por $\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}}^{(b)} = s(X_1^{(b)}, \dots, X_N^{(b)}).$ 4. Se repiten los pasos 2–3 muchas veces (B = 1,000 - 10,000).

 - 5. Se calcula la desviación estándar de los valores $\hat{\theta}_{\mathsf{MLF}}^{(b)}$ obtenidos. Este es el error estándar estimado para el estimador $\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}}$.

1.0.2. Observación:

- Nota cómo cambiamos el mecanismo de remuestreo $\hat{\mathbb{P}}_N$ por $\mathbb{P}(x;\hat{\theta}_{\mathsf{MLE}})$.
- En espíritu es lo mismo, pero estamos dispuestos a incorporar mayores supuestos en nuestra tarea de inferencia.

Bootstrap World Real World Unknown Observed random Bootstrap **Empirical** probability sample sample distribution distribution $\hat{P} \longrightarrow X^* = (X_1^*, \dots, X_n^*)$ $P \longrightarrow X = (X_1, \dots, X_n)$ $\hat{\theta}^* = s(X^*)$ $\hat{\theta} = s(X)$ Bootstrap replication Statistic of interest

FIGURA 1. Imagen tomada del material del curso de Cómputo Estadístico de Michael Eichler.

Ejempo: Datos normales

Como ejercicio, podemos encontrar los estimadores de máxima verosimilitud cuando tenemos una muestra $X_1, \ldots, X_N \stackrel{\text{iid}}{\sim} \mathsf{N}(\mu, \sigma^2)$ (puedes derivar e igualar a cero para encontrar el mínimo). También podemos resolver numéricamente.

Supongamos que tenemos la siguiente muestra:

```
set.seed (41852)
muestra \leftarrow rnorm(150, mean = 1, sd = 2)
```

Para la cual podemos calcular los estimadores de máxima verosimilitud de un modelo normal

```
mle.obs ← broom::tidy(MASS::fitdistr(muestra, "normal")) ▷
  tibble::column_to_rownames("term")
```

estimate std.error



```
mean 1.136 0.1502
3 sd 1.839 0.1062
```

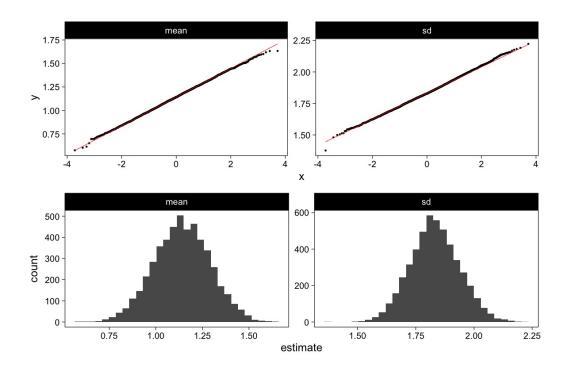
Con esto podemos definir el estimador y el proceso de remuestreo.

```
## paso 1: define el estimador
estimador_mle 		function(datos, modelo = "normal"){
   datos >
        MASS::fitdistr(modelo) >
        broom::tidy() >
        select(-std.error)
}

## paso 2: define el proceso de remuestreo
```

```
## paso 3: define el paso bootstrap
paso_bootstrap ← function(id){
  muestra ▷
      paramboot_sample() ▷
      estimador_mle()
}
```

```
## paso 4: aplica bootstrap parametrico
boot_mle 
map_df(1:5000, paso_bootstrap)
```



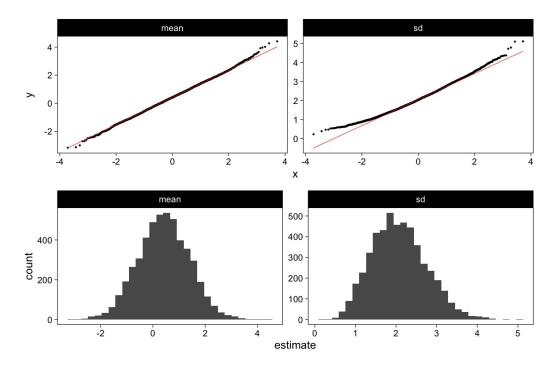


Las distribuciones son aproximadamente normales. Nótese que esto no siempre sucede, especialmente con parámetros de dispersión como σ . (Examina las curvas de nivel del ejemplo de arriba).

Ahora, supongamos que tenemos una muestra más chica. Repasa los pasos para asegurarte que entiendes el procedimiento:

```
estimate std.error
mean 0.3979 0.9794
sd 2.3990 0.6925
```

```
## paso 4: aplica bootstrap parametrico
boot_mle \( \tau \) map_df(1:5000, paso_bootstrap)
```



Donde vemos que la distribución de σ tienen sesgo a la derecha, pues en algunos casos obtenemos estimaciones muy cercanas a cero. Podemos usar intervalos de percentiles.

1.2. Comparación bootstrap paramétrico y no paramétrico



```
## paso 1: define el estimador
estimador 		 function(split, ...) {
   muestra 		 analysis(split) 		 group_by(momento)
   muestra 		 summarise(estimate = mean(cuenta_total), .groups = 'drop') 		 mutate(term = momento)
}
```

```
## paso 2 y 3: remuestrea y calcula estimador
boot_samples \( \to \text{ bootstraps}(propinas, strata = momento, 500) \( \text{ } \)
mutate(res_boot = map(splits, estimador))
## paso 4: construye intervalos de confianza
intervalos_noparam \( \to \text{ boot_samples } \to \text{ int_pctl(res_boot, alpha = 0.05) } \text{ } \)
mutate(across(where(is.numeric), round, 2))
intervalos_noparam
```

```
# A tibble: 2 × 6

term .lower .estimate .upper .alpha .method

chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <chr>
Cena 19.7 20.8 22.0 0.1 percentile

Comida 15.7 17.2 18.7 0.1 percentile
```

Ahora, implementaremos el método bootstrap paramétrico.

```
## paso 1: define estimador
   estimador_mle_grupos 
function(muestra, modelo = "normal") {
    \mathtt{muestra} \, \, \triangleright \,
      select(momento, cuenta_total) >
      group_by(momento) ⊳
5
      nest(data = cuenta_total) >
6
      summarise(mle = map(data, function(x) {
       \mathtt{nobs} \leftarrow \mathtt{nrow}(\mathtt{x})
8
        unlist(x) >
9
       estimador_mle(modelo = modelo) >
10
           mutate(n = nobs)
       }))
12
13 }
```

```
mle.obs \( \to \) estimador_mle_grupos(propinas, "normal")
mle.obs \( \to \) unnest(mle)
```



```
1 # A tibble: 4 \times 4
   momento term estimate
7 4 Comida sd 7.66
                            68
1 ## paso 2: define proceso de remuestreo
param_boot_grupos ← function(estimadores){
3
   estimadores \triangleright
     group_by(momento) ⊳
     mutate(simulaciones = map(mle, function(m){
6
      tibble(cuenta_total = rnorm(m$n[1], m$estimate[1], sd = m$estimate[2]))
    })) ⊳
7
    unnest(simulaciones) >
8
     select(-mle) ⊳
9
    ungroup()
10
  }
11
## paso 3: paso bootstrap
paso_bootstrap_grupos ← function(id){
param_boot_grupos(mle.obs) ▷
     estimador_mle_grupos()
4
5 }
1 ## paso 4: aplica bootstrap y presenta intervalos
2 intervalos_param ← tibble(id = 1:500)⊳
    mutate(estimadores = map(id, paso_bootstrap_grupos)) >
    	ext{unnest(estimadores)} \, \rhd \,
    unnest(mle) >
    group_by(momento, term) ⊳
    summarise(.lower = quantile(estimate, 0.025),
              .estimate = mean(estimate),
8
              .upper = quantile(estimate, 0.975),
9
              .alpha = .05,
10
              .method = "percentile (normal)", .groups = "drop") \triangleright
11
   filter(term == "mean") > select(-term)
13 intervalos_param
 # A tibble: 2 \times 6
   momento .lower .estimate .upper .alpha .method
    4 1 Cena 19.6 20.8 22.1 0.1 percentile (normal) 5 2 Comida 15.3 17.1 18.8 0.1 percentile (normal)
  # A tibble: 2 \times 6
1
    term .lower .estimate .upper .alpha .method
    4 1 Cena 19.7
5 2 Comida 15.7
                     20.8 22.0 0.1 percentile
                    17.2 18.7 0.1 percentile
```



```
# A tibble: 1 × 6

term .lower .estimate .upper .alpha .method

chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <chr>
1 Cena 17.8 20.8 23.9 0.1 percentile (exponential)
```

El modelo exponencial nos da intervalos mas anchos (mayor incertidumbre) lo cual ilustra que si el modelo paramétrico no es el adecuado, los supuestos adicionales sirven poco para mejorar la estimación de incertidumbre.

1.3. Ejemplo: Datos de viento

Consideremos los siguientes datos que corresponden datos de producción energética por medio de una turbina de viento. En este caso nos interesa estimar el percentil $10\,\%$ pues es lo que esperaríamos que la turbina genere el $90\,\%$ de las veces.

```
library(resampledata)
data(Turbine)
Turbine > tibble()
```

Esperamos los problemas usuales de nuestro estimador si utilizáramos el **bootstrap** no paramétrico.

```
Turbine > summarise(estimate = quantile(Production, probs = .1))

estimate
1    1817

## paso 1: define el estimador
calcula_percentil \( \times \) function(split, \( \times \)) {
    split > analysis() > summarise(estimate = quantile(Production, probs = .1)) > mutate(term = "Percentil")
}

nonparam_boot \( \times \) bootstraps(Turbine, 1000) >>
```

Si asumimos un modelo Weibull (k,λ) para los datos. Es decir, consideramos $X\sim$ Weibull (k,λ) de tal forma que X tiene función de densidad

mutate(resultados = map(splits, calcula_percentil))

$$\pi(x; k, \lambda) = \begin{cases} \frac{k}{\lambda} \left(\frac{x}{\lambda}\right)^{k-1} e^{-(x/\lambda)^k}, & \text{si } x \ge 0, \\ 0, & \text{si } x < 0. \end{cases}$$
(4)

Estimando los parámetros obtenemos lo siguiente. Revisa los pasos para asegurarte que queda claro el procedimiento.



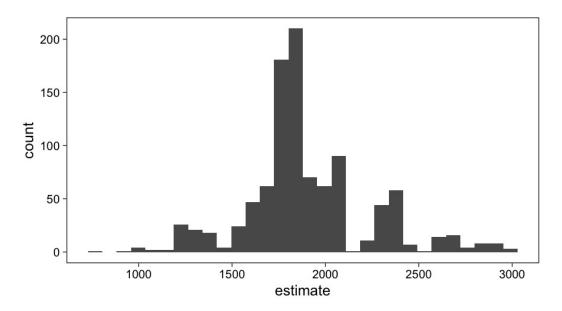


Figura 2. Histograma bootstrap de percentil 10 %.

```
## paso 1: define el estimador
ajusta_weibull ← function(data){
   tibble(data) ▷
   filter(Production > 0) ▷
   pull(Production) ▷
   MASS::fitdistr("weibull") ▷
   broom::tidy() ▷
   select(-std.error) ▷
   tibble::column_to_rownames("term")
}

mle.weibull ← ajusta_weibull(Turbine)
mle.weibull
```

```
estimate
shape 1.283
scale 11795.041
```

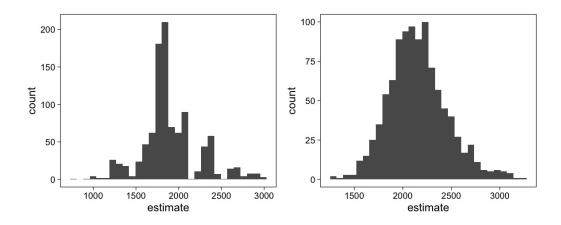


```
tibble(estimate = .)

## paso 3: define el paso bootstrap
paso_bootstrap 
paso_bootstrap 
function(id){

Turbine 
paramboot_sample() 
ajusta_weibull() 
extrae_cuantil()
```

```
## paso 4: aplica bootstrap parametrico
param_boot \leftarrow map_df(1:1000, paso_bootstrap)
```



 $\label{eq:figura} Figura~3.~\textit{Histogramas}~bootstrap~\textit{del percentil}~10\,\%.~\textit{En la izquierda utilizando el método no paramétrico, en la derecha utilizando el método paramétrico con distribución Weibull.}$

Los intervalos de confianza son los siguientes.

```
# A tibble: 1 × 7

term .lower .estimate .upper .alpha .method .length

chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> 1 Percentil 1261. 1898. 2715. 0.05 percentile (noparam) 1454.
```

```
# A tibble: 1 × 7

term .lower .estimate .upper .alpha .method .length

<chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <chr> <dbl> 2155. 2687. 0.05 percentile (param) 988.
```

1.4. El método de momentos

Utilizar máxima verosimilitud **no** es al única manera de poder realizar *bootstrap* paramétrico. Podemos utilizar **el método de momentos**, el cual es otra aplicación directa de la ley de los grandes números.



1.4.1. Definición [método de momentos]: Supongamos que queremos estimar k parámetros de un modelo paramétrico $X \sim \mathbb{P}(\cdot; \theta)$. Es decir, queremos realizar inferencia sobre $\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^k$. Supongamos que podemos escribir el siguiente sistema de ecuaciones

$$\mu_1 = \mathbb{E}[X] = g_1(\theta_1, \dots, \theta_k),$$

$$\mu_2 = \mathbb{E}[X^2] = g_2(\theta_1, \dots, \theta_k),$$

$$\vdots$$

$$\mu_k = \mathbb{E}[X^k] = g_k(\theta_1, \dots, \theta_k).$$

Sea $X_1,\ldots,X_N\stackrel{\mathsf{iid}}{\sim} \mathbb{P}(.;\theta)$ una muestra del modelo probabilístico y denotemos por

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} x_n^k \,, \tag{5}$$

los promedios basados en la muestra. Entonces, el estimador de momentos del vector $\theta \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^k$ está dado por la solución del sistema de ecuaciones

$$\hat{\mu}_1 = g_1(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_k),$$

$$\hat{\mu}_2 = g_2(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_k),$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mu}_k = g_k(\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_k).$$

1.4.2. Ejemplo: Consideremos los datos $X_1,\ldots,X_N\stackrel{\mathsf{iid}}{\sim}\mathsf{Gamma}(\alpha,\beta)$ donde tenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$\alpha = \frac{\mathbb{E}(X)^2}{\mathbb{V}(X)}, \qquad \beta = \frac{\mathbb{V}(X)}{\mathbb{E}(X)}.$$

Los cuales podemos estimar utilizando las aproximaciones

$$\mathbb{E}(X^k) \approx \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N x_n^k. \tag{6}$$

1.5. Ventajas y desventajas de bootstrap paramétrico

- Ventaja: el bootstrap paramétrico puede dar estimadores más precisos e intervalos más angostos y bien calibrados que el no paramétrico, siempre y cuando el modelo teórico sea razonable.
- Desventaja: Es necesario decidir el modelo teórico, que tendrá cierto grado de desajuste vs. el proceso generador real de los datos. Si el ajuste es muy malo, los resultados tienen poca utilidad. Para el no paramétrico no es necesario hacer supuestos teóricos.
- Ventaja: el bootstrap paramétrico puede ser más escalable que el no paramétrico, pues no es necesario cargar y remuestrear los datos originales, y tenemos mejoras adicionales cuando tenemos expresiones explícitas para los estimadores de máxima verosimilitud (como en el caso normal, donde es innecesario hacer optimización numérica).
- Desventaja: el bootstrap paramétrico es conceptualmente más complicado que el no paramétrico, y como vimos arriba, sus supuestos pueden ser más frágiles que los del no paramétrico.



REFERENCIAS REFERENCIAS

REFERENCIAS

[1] L. M. Chihara and T. C. Hesterberg. *Mathematical Statistics with Resampling and R.* John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ, USA, aug 2018. ISBN 978-1-119-50596-9 978-1-119-41654-8. . 1

[2] B. Efron and R. J. Tibshirani. An Introduction to the Bootstrap. Springer US, Boston, MA, 1993. ISBN 978-0-412-04231-7 978-1-4899-4541-9.

