Введение в математическую статистику. Доверительные интервалы. Бутстрэп

Леонид Иосипой

Программа «Математика для анализа данных»
Центр непрерывного образования, ВШЭ

3 февраля 2021

- Доверительные интервалы
- Распределения, связанные с нормальным
- Доверительные интервалы в нормальной модели
- Бутстрэп

Доверительные интервалы

Пусть, как обычно, имеется реализация выборки $x_1, \ldots, x_n$ из некоторого распределения F_θ с неизвестным параметром

$$\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}.$$

До сих пор мы занимались «точечным оцениванием» неизвестного параметра — находили оценку, способную в некотором смысле заменить параметр.

Существует другой подход к оцениванию, при котором мы указываем интервал, накрывающий параметр с заданной наперед вероятностью. Такой подход называется «интервальным оцениванием».

Доверительные интервалы

Пусть $\alpha \in (0, 1)$. Две оценки $\widehat{\theta}_1$ и $\widehat{\theta}_2$ определяют границы доверительного интервала для параметра θ с коэффициентом доверия $1 - \alpha$, если для выборки $\mathbf{X} = (X_1, \ldots, X_n)$ из закона распределения F_θ при всех $\theta \in \Theta$ справедливо неравенство

$$\mathbb{P}\left(\widehat{\theta}_1(\mathbf{X}) < \theta < \widehat{\theta}_2(\mathbf{X})\right) \geq 1 - \alpha.$$

Как правило, длина доверительного интервала возрастает при увеличении коэффициента доверия $1 - \alpha$ и стремится к нулю с ростом размера выборки n.

Доверительные интервалы

Если вероятность в левой части неравенства в пределе не превосходит $1 - \alpha$ при $n \to \infty$, то есть выполняется

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{P}\left(\widehat{\theta}_1(\mathbf{X}) < \theta < \widehat{\theta}_2(\mathbf{X})\right) \geq 1 - \alpha,$$

то доверительный интервал называется асимптотическим.

Асимптотические доверительные интервалы возникают тогда, когда мы пользуемся предельными теоремами (например, центральной предельной теоремой).

С асимптотическим доверительным интервалом мы сталкивались, когда изучали метод Монте-Карло.

Доверительные интервалы

Неравенство «$\geq 1 - \alpha$» обычно соответствует дискретным распределениям, когда нельзя добиться равенства.

Например, для $X \sim \mathbf{B}_{1/2}$ равенство $\mathbb{P}(X < a) = 0.25$ невозможно при любом a, а неравенство имеет смысл:

$$\mathbb{P}(X < a) \geq 0.25 \quad \text{для } a > 0.$$

Если вероятность доверительному интервалу накрыть параметр равна $1 - \alpha$, интервал называют точным доверительным интервалом.

Доверительные интервалы

Прежде чем рассматривать какие-то способы построения доверительных интервалов, разберем два примера и затем попробуем извлечь из этих примеров некоторую общую философию доверительных интервалов.

Доверительные интервалы

Задача

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из нормального распределения $\mathcal{N}(\theta, \sigma^2)$ с неизвестным параметром $\theta \in \mathbb{R}$ и известным параметром $\sigma^2 > 0$.

Построить точный доверительный интервал для параметра θ уровня доверия $1 - \alpha$.

Доверительные интервалы

Решение. Будем пользоваться фактом, что нормальное распределение устойчиво по суммированию:

если

- $X_1 \sim \mathcal{N}(a_1, \sigma_1^2)$,
- $X_2 \sim \mathcal{N}(a_2, \sigma_2^2)$,
- X_1 и X_2 независимы,

то

$$X_1 + X_2 \sim \mathcal{N}(a_1 + a_2, \sigma_1^2 + \sigma_2^2).$$

Доверительные интервалы

Поэтому распределение суммы элементов выборки нормально:

$$n\overline{X} = X_1 + \ldots + X_n \sim \mathcal{N}(n\theta, n\sigma^2).$$

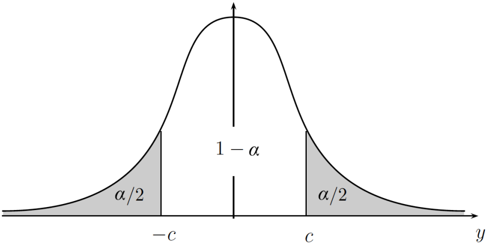
Следовательно, после стандартизации суммы мы получим стандартное нормальное распределение:

$$\frac{n\overline{X} - n\theta}{\sqrt{n\sigma^2}} = \frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)}{\sigma} \sim \mathcal{N}(0, 1).$$

Доверительные интервалы

По заданному $\alpha > 0$ найдём число c такое, что

$$\mathbb{P}\left(-c < \frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \theta)}{\sigma} < c\right) = 1 - \alpha.$$



Доверительные интервалы

Разрешив затем неравенство внутри вероятности относительно θ, получим точный доверительный интервал:

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c\sigma}{\sqrt{n}} < \theta < \overline{X} + \frac{c\sigma}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha.$$

Это можно записать и так:

$$\theta \in \left(\overline{X} - \frac{c\sigma}{\sqrt{n}}, \overline{X} + \frac{c\sigma}{\sqrt{n}}\right) \quad \text{с вероятностью } 1 - \alpha.$$

Доверительные интервалы

Пусть $F(x)$ — функция распределения некоторого закона.
Число c_α называется квантилью уровня α, если $F(c_\alpha) = \alpha$.

Если функция F строго монотонна, квантиль определяется единственным образом.

Доверительные интервалы

Итак, искомый точный доверительный для нормального распределения имеет вид:

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c_{1-\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}} < \theta < \overline{X} + \frac{c_{1-\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha,$$

где мы использовали тот факт, что $c_{\alpha/2} = -c_{1-\alpha/2}$.

- Какова середина полученного доверительного интервала?
- Какова его длина?
- Что происходит с его границами при $n \to \infty$?

Доверительные интервалы

- Зачем мы брали симметричные квантили?
- Какой будет длина, например, у такого доверительного интервала?

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c_{1-\alpha/3}\sigma}{\sqrt{n}} < \theta < \overline{X} + \frac{c_{1-2\alpha/3}\sigma}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha$$

- Какой из двух доверительных интервалов одного уровня доверия и разной длины следует предпочесть?

Доверительные интервалы

Задача

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из экспоненциального распределения Exp_θ с неизвестным параметром $\theta > 0$.

Построить асимптотически точный доверительный интервал для параметра θ уровня доверия $1 - \alpha$.

Доверительные интервалы

Решение. Вспомним центральную предельную теорему: для больших n

$$\frac{n\overline{X} - \mathbb{E}[n\overline{X}]}{\sqrt{\mathrm{Var}(n\overline{X})}} = \frac{\sqrt{n}(\overline{X} - 1/\theta)}{1/\theta} = \sqrt{n}(\theta\overline{X} - 1) \quad \approx \quad \mathcal{N}(0, 1).$$

Следовательно, можем записать, что для произвольных $a < b$

$$\mathbb{P}\Big(a < \sqrt{n}(\theta\overline{X} - 1) < b\Big) \to \mathbb{P}\Big(a < Z < b\Big) \quad \text{при } n \to \infty.$$

Доверительные интервалы

Возьмём, как в прошлой задаче, следующие квантили стандартного нормального распределения:

$$a = c_{\alpha/2} = -c_{1-\alpha/2}, \quad b = c_{1-\alpha/2},$$

и получим

$$\mathbb{P}\Big(-c_{1-\alpha/2} < \sqrt{n}(\theta\overline{X} - 1) < c_{1-\alpha/2}\Big) \to 1 - \alpha \quad \text{при } n \to \infty.$$

Доверительные интервалы

Разрешив относительно θ неравенство внутри вероятности, получим асимптотический доверительный интервал:

$$\mathbb{P}\left(\frac{1}{\overline{X}} - \frac{c_{1-\alpha/2}}{\overline{X}\sqrt{n}} < \theta < \frac{1}{\overline{X}} + \frac{c_{1-\alpha/2}}{\overline{X}\sqrt{n}}\right) \to 1-\alpha \quad \text{при } n \to \infty.$$

Доверительные интервалы

Построение точных доверительных интервалов:

1. Найти функцию $G(\mathbf{X}, \theta)$ с известным распределением, которое не зависит от неизвестного параметра θ. Необходимо, чтобы функция $G(\mathbf{X}, \theta)$ была обратима по θ.
2. Найти числа c_1 и c_2 — квантили распределения, для которых
$$\mathbb{P}(c_1 < G(\mathbf{X}, \theta) < c_2) = 1 - \alpha.$$
3. Разрешив неравенство $c_1 < G(\mathbf{X}, \theta) < c_2$ относительно θ получить точный доверительный интервал.

Доверительные интервалы

Построение асимптотических доверительных интервалов:

1. Найти функцию $G(\mathbf{X}, \theta)$, которая бы сходилась к известной случайной величине Z, не зависящей от неизвестного параметра θ. Необходимо, чтобы функция $G(\mathbf{X}, \theta)$ была обратима по θ.
2. Найти числа c_1 и c_2 — квантили распределения Z, для которых
$$\mathbb{P}(c_1 < G(\mathbf{X}, \theta) < c_2) \to \mathbb{P}(c_1 < Z < c_2) = 1 - \alpha.$$
3. Разрешив неравенство $c_1 < G(\mathbf{X}, \theta) < c_2$ относительно θ получить асимптотический доверительный интервал.

Доверительные интервалы

Задача

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \theta^2)$ с известным параметром $\mu \in \mathbb{R}$ и неизвестным параметром $\theta^2 > 0$.

Построить точный доверительный интервал для параметра θ^2 уровня доверия $1 - \alpha$.

Доверительные интервалы

Можно ли, пользуясь схемой построения доверительного интервала для среднего нормального распределения, построить точный доверительный интервал для дисперсии?

Попробуйте разрешить неравенство относительно θ:

$$-c < \frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \mu)}{\theta} < c.$$

- Чем плох интервал бесконечной длины?
- А получился ли интервал бесконечной длины?

Распределения, связанные с нормальным

Мы построили точный доверительный интервал для среднего $\mu \in \mathbb{R}$ нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ при известной дисперсии $\sigma^2 > 0$.

Остался нерешённым вопрос: как построить точные доверительные интервалы для σ^2 при известном и при неизвестном μ, а также для μ при неизвестной σ^2.

Распределения, связанные с нормальным

Для решения этих задач требуется отыскать такие функции от выборки и неизвестных параметров, распределения которых не зависят от этих параметров.

Особый интерес к нормальному распределению связан, разумеется, с центральной предельной теоремой: почти всё в этом мире нормально (или близко к нормальному).

Распределение хи-квадрат

Пусть $X_1, \ldots, X_k$ независимы и имеют стандартное нормальное распределение $\mathcal{N}(0, 1)$.

Распределением χ^2 (хи-квадрат) с k степенями свободы называется распределение случайной величины

$$Y = X_1^2 + \ldots + X_k^2.$$

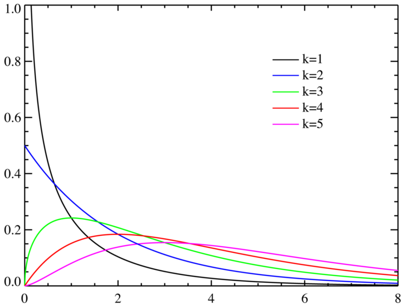
Обозначение: χ_k^2 или H_k.

Распределение хи-квадрат

Плотность распределения хи-квадрат с k степенями свободы:

$$f(u) = \begin{cases} \frac{1}{2^{k/2}\Gamma(k/2)}\, u^{k/2-1} e^{-u/2}, & u > 0, \\ 0, & u \le 0, \end{cases}$$

где $\Gamma(u)$ — гамма-функция Эйлера (специальная функция).



Распределение хи-квадрат

Задача

Пусть $X_1, \dots, X_n$ — выборка из нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \theta^2)$ с известным параметром $\mu \in \mathbb{R}$ и неизвестным параметром $\theta^2 > 0$.

Построить точный доверительный интервал для параметра θ^2 уровня доверия $1 - \alpha$.

Распределение хи-квадрат

Решение. В этой модели можно рассмотреть статистику:

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{X_i-\mu}{\theta}\right)^2 \sim \chi^2_n.$$

Пусть $c_{\alpha/2}$ и $c_{1-\alpha/2}$ будут соответствующими квантилями χ^2_n. Тогда

$$\mathbb{P}\left(c_{\alpha/2} < \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{X_i-\mu}{\theta}\right)^2 < c_{1-\alpha/2}\right) = 1-\alpha.$$

Распределение хи-квадрат

Разрешив неравенство, получим

$$\mathbb{P}\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2}{c_{1-\alpha/2}} < \theta^2 < \frac{\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2}{c_{\alpha/2}}\right) = 1-\alpha.$$

Обозначим оценку дисперсии σ^2 при известном μ через S_o^2:

$$S_o^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2,$$

Тогда доверительный интервал можно записать так:

$$\mathbb{P}\left(\frac{nS_o^2}{c_{1-\alpha/2}} < \theta^2 < \frac{nS_o^2}{c_{\alpha/2}}\right) = 1-\alpha,$$

где $c_{\alpha/2}$ и $c_{1-\alpha/2}$ — квантили распределения χ^2_n.

Распределение хи-квадрат

Задача

Пусть $X_1, \dots, X_n$ — выборка из нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ с неизвестными параметрами $\mu \in \mathbb{R}$ и $\sigma^2 > 0$.

Построить точный доверительный интервал для параметра σ^2 уровня доверия $1 - \alpha$.

Распределение хи-квадрат

Решение. Обозначим несмещенную оценку дисперсии σ^2 при неизвестном μ через S^2:

$$S^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2.$$

Рассмотрим статистику

$$\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{X_i - \overline{X}}{\sigma}\right)^2 = \frac{(n-1)S^2}{\sigma^2}.$$

Из некоторого общего факта (лемма Фишера) следует, что

$$\frac{(n-1)S^2}{\sigma^2} \sim \chi^2_{n-1}.$$

Распределение хи-квадрат

Проводя все те же вычисления, что и в предыдущей задаче, мы получим:

$$\mathbb{P}\left(\frac{(n-1)S^2}{c_{1-\alpha/2}} < \sigma^2 < \frac{(n-1)S^2}{c_{\alpha/2}}\right) = 1-\alpha,$$

где $c_{\alpha/2}$ и $c_{1-\alpha/2}$ уже квантили χ^2_{n-1}.

Распределение Стьюдента

Английский статистик Госсет, публиковавший научные труды под псевдонимом Стьюдент, ввёл следующее распределение.

Пусть $X_0, X_1, \ldots, X_k$ независимы и имеют стандартное нормальное распределение $\mathcal{N}(0, 1)$.

Распределением Стьюдента с k степенями свободы называется распределение случайной величины

$$Y = \frac{X_0}{\sqrt{\frac{X_1^2 + \ldots + X_k^2}{k}}}$$

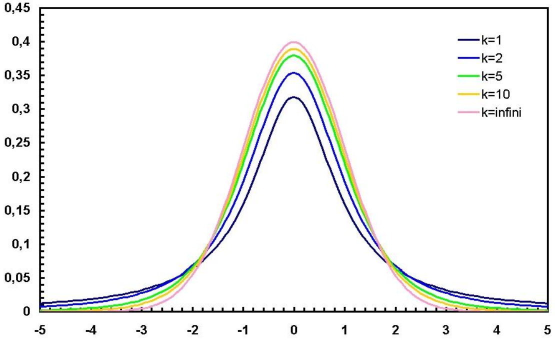
Обозначение: t_k или T_k.

Распределение Стьюдента

Плотность распределения Стьюдента с k степенями свободы:

$$f(u) = \frac{\Gamma(\frac{k+1}{2})}{\sqrt{k\pi}\Gamma(\frac{k}{2})}\left(1 + \frac{u^2}{k}\right)^{-\frac{k+1}{2}},$$

где $\Gamma(u)$ — гамма-функция Эйлера (специальная функция).



Распределение Стьюдента

Задача

Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из нормального распределения $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ с неизвестными параметрами $\mu \in \mathbb{R}$ и $\sigma^2 > 0$.

Построить точный доверительный интервал для параметра μ уровня доверия $1 - \alpha$.

Распределение Стьюдента

В данной модели можно показать, что

$$\frac{\sqrt{n}(\overline{X} - \mu)}{S} \sim t_{n-1},$$

где, напомним, S^2 — несмещенная оценка дисперсии,

$$S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (X_i - \overline{X})^2.$$

Распределение Стьюдента

Поэтому

$$\mathbb{P}\left(-c_{1-\alpha/2} < \frac{\sqrt{n}(\overline{X}-\mu)}{S} < c_{1-\alpha/2}\right) = 1-\alpha,$$

где $c_{1-\alpha/2}$ — квантиль t_{n-1} (так как распределение Стьюдента симметрично, то $c_{\alpha/2} = -c_{1-\alpha/2}$).

Разрешив неравенство, получим

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c_{1-\alpha/2}S}{\sqrt{n}} < \mu < \overline{X} + \frac{c_{1-\alpha/2}S}{\sqrt{n}}\right) = 1-\alpha.$$

Доверительные интервалы в нормальной модели

Резюме. Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

- доверительный интервал для μ при известном σ^2:

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c_{1-\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}} < \mu < \overline{X} + \frac{c_{1-\alpha/2}\sigma}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha,$$

  где $c_{1-\alpha/2}$ — квантиль распределения $\mathcal{N}(0, 1)$.

- доверительный интервал для μ при неизвестном σ^2:

$$\mathbb{P}\left(\overline{X} - \frac{c_{1-\alpha/2}S}{\sqrt{n}} < \mu < \overline{X} + \frac{c_{1-\alpha/2}S}{\sqrt{n}}\right) = 1 - \alpha,$$

  где $c_{1-\alpha/2}$ — квантиль распределения t_{n-1}.

Доверительные интервалы в нормальной модели

Резюме. Пусть $X_1, \ldots, X_n$ — выборка из $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

- доверительный интервал для σ^2 при известном μ:

$$\mathbb{P}\left(\frac{nS_o^2}{c_{1-\alpha/2}} < \sigma^2 < \frac{nS_o^2}{c_{\alpha/2}}\right) = 1 - \alpha,$$

где $c_{\alpha/2}$ и $c_{1-\alpha/2}$ — квантили распределения χ^2_n.

- доверительный интервал для σ^2 при неизвестном μ:

$$\mathbb{P}\left(\frac{(n-1)S^2}{c_{1-\alpha/2}} < \sigma^2 < \frac{(n-1)S^2}{c_{\alpha/2}}\right) = 1 - \alpha,$$

где $c_{\alpha/2}$ и $c_{1-\alpha/2}$ — квантили распределения χ^2_{n-1}.

Бутстрэп

Бутстрэп — это набор практических методов, который основан на многократной генерации выборок на базе одной имеющейся выборки.

Бутстрэп используется для оценки каких-то параметров распределений, построения доверительных интервалов и т.д.

Мы рассмотрим параметрический и непараметрический бутстрэп. Начнем с параметрического.

Бутстрэп

Параметрический бутстрэп

Идея заключается в том, что если оценка $\widehat{\theta}$ близка к настоящему параметру θ_0, то распределение $F_{\widehat{\theta}}$ будет похоже на F_{θ_0}. Поэтому можно генерировать новые выборки из $F_{\widehat{\theta}}$.

Мы здесь предполагаем, что семейство распределений F_θ непрерывно зависит от параметра.

Бутстрэп

Пример

Допустим, мы построили какую-то оценку $\widehat{\theta}$ неизвестного параметра θ. Ни один из методов построения оценок, которые мы изучали, не гарантирует несмещенность.

Попытаемся исправить смещенность оценки с помощью параметрического бутстрэпа.

Бутстрэп

Это можно сделать следующим образом:

- сгенерировать выборку $Y_1, \ldots, Y_n$ из $F_{\widehat{\theta}}$, и подсчитать по ней $\widehat{\theta}(Y_1, \ldots, Y_n)$;
- «оценить» смещение $\mathbb{E}\left[\widehat{\theta}(X_1, \ldots, X_n)\right] - \theta_0$ с помощью $\widehat{\theta}(X_1, \ldots, X_n) - \widehat{\theta}(Y_1, \ldots, Y_n)$;
- посчитать «поправленную» оценку

$$2\widehat{\theta}(X_1, \ldots, X_n) - \widehat{\theta}(Y_1, \ldots, Y_n).$$

Бутстрэп

Бутстрэп имеет несколько неоспоримых плюсов — он прост в использовании, не требует сложных вычислений и применим даже к весьма громоздким моделям.

С другой стороны, мы не можем явным образом оценить его погрешность, а в случае, если оценка $\widehat{\theta}$ значимо промахнулась мимо θ_0, рискуем неправильно изменить оценку.

Бутстрэп

Как строить доверительные интервалы с помощью бутстрэпа?

Существует и несколько методов построения доверительных интервалов. Наиболее простой из них — pivotal интервал.

Бутстрэп

Идея: рассмотрим оценку $\widehat{\theta}$ параметра θ_0.

- возьмем несколько выборок из $F_{\widehat{\theta}}$ и построим на их основе другие оценки $\widehat{\theta}_1, \ldots, \widehat{\theta}_m$;
- упорядочим $\widehat{\theta}_i$ и выберем те из них, $\widehat{\theta}_-$ и $\widehat{\theta}_+$, которые стоят на местах $[(\alpha/2)m]$ и $[(1-\alpha/2)m]$ по возрастанию;
- тогда нашим интервалом будет

$$\left(\widehat{\theta}_-\,,\,\widehat{\theta}_+\right).$$

Бутстрэп

Непараметрический бутстрэп

Очень часто бутстрэп используется в непараметрической постановке. Это означает, что у нас нет никакого семейства распределений F_θ, а есть только реализация выборки $x_1, \ldots, x_n$ из некоторого неизвестного распределения F.

В этом случае бустрэп-выборки генерируются с помощью выбора с возвращением.

Бутстрэп

Теоретически это можно обосновать с помощью понятия эмпирической функции распределения.

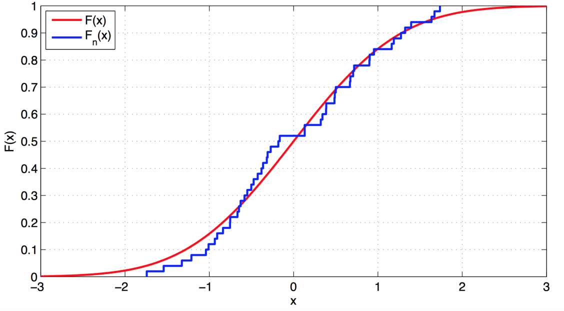
Эмпирическая функция распределения $\widehat{F}_n(u)$ определяется формулой

$$\widehat{F}_n(u) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \mathbf{I}_{\{x_i \le u\}},$$

где $\mathbf{I}_{\{x_i \le u\}}$ — индикатор события $\{x_i \le u\}$.

Бутстрэп

График $\widehat{F}_n(x)$ представляет собой ступенчатую функцию, растущую скачками высоты $1/n$. Скачки происходят в точках с координатами $x_1, \ldots, x_n$.



Бутстрэп

Известно, что эмпирическая функция распределения является очень хорошим приближением для истинной функции распределения.

Следовательно, чтобы сгенерировать бустрэп-выборку, можно использовать закон, соответствующий эмпирической функции распределении.

А это и будет выбором с возвращением.

Спасибо за внимание!