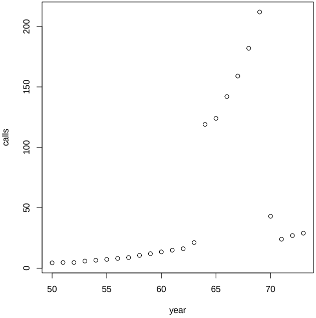
MAT-266: Métodos para regresión robusta, M-estimadores

Felipe Osorio

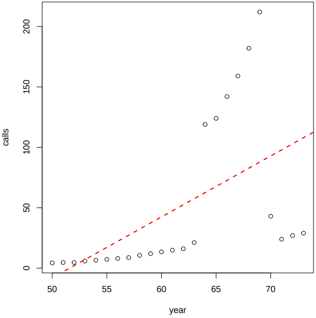
fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM

Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973



(a) llamadas telefónicas



(b) recta ajustada

M-estimación

Para introducir ideas considere $X_1, \dots, X_n$ variables aleatorias IID. Sabemos que la media muestral $\overline{X}$ es solución del problema,

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{n} (x_i - \theta)^2,$$

o análogamente,

$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - \theta) = 0.$$

Mientras que, la mediana $\operatorname{me}(\boldsymbol{x})$ que es robusta contra outliers, es solución del problema

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{n} |x_i - \theta|,$$

es decir $\operatorname{me}(\boldsymbol{x})$ es solución de la ecuación

$$\sum_{i=1}^{n} \left\{(-1) I_{(-\infty,0)}(x_i - \theta) + I_{(0,\infty)}(x_i - \theta)\right\} = 0.$$

El MLE $\widehat{\theta}_{\mathsf{ML}}$ en un modelo paramétrico es el minimizador del negativo de la log-verosimilitud

$$\min_{\theta}\ \Big\{-\sum_{i=1}^{n}\log f(x_i;\theta)\Big\},$$

y en el caso de que $\ell(\theta)=\sum_{i=1}^{n}\log f(x_i;\theta)$ sea diferenciable, $\widehat{\theta}_{\mathsf{ML}}$ es solución de

$$\sum_{i=1}^{n}\frac{\partial\log f(x_i;\theta)}{\partial\theta}=0,$$

lo que lleva a la siguiente definición

Definición 1 (M-estimador):

Para $X_1,\dots,X_n$ variables aleatorias IID. El M-estimador $\widehat{\theta}_{\mathsf{M}}$ con respecto a la función $\psi:\mathbb{R}\times\Theta\to\mathbb{R}$ se define como la solución de

$$\sum_{i=1}^{n}\psi(X_i;\widehat{\theta}_{\mathsf{M}})=0. \tag{1}$$

Usualmente (1) corresponde a la solución del problema

$$\min_\theta \sum_{i=1}^n \rho(x_i;\theta),$$

si ρ es diferenciable, entonces

$$\psi(x;\theta) = c\,\frac{\partial\rho(x;\theta)}{\partial\theta},$$

para alguna constante c.

Observación:

Para simplificar la notación podemos hacer

$$\rho(x;\theta) = \widetilde{\rho}(x-\theta), \qquad \psi(x;\theta) = \widetilde{\psi}(x-\theta).$$

Ejemplo (Estimador LS)[1]:

Sea $z = x - \theta$. Las funciones $\widetilde{\rho}(z) = z^2$ y $\widetilde{\psi}(z) = z$ llevan a la media muestral.

[1] O bien, estimadores L_2.

Ejemplo (Estimador LAD)[2]*:*

La mediana es un M-estimador con $\widetilde{\rho}(z) = |z|$, y

$$\widetilde{\psi}(z) = \begin{cases} -1, & z < 0, \\ 0, & z = 0, \\ 1, & z > 0. \end{cases}$$

Ejemplo (Media recortada):

La primera propuesta de Huber (1981) para reducir la influencia de outliers es

$$\widetilde{\rho}(z) = \begin{cases} z^2, & |z| \leq k, \\ k^2, & |z| > k, \end{cases}$$

donde k es una constante de tuning, y

$$\widetilde{\psi}(z) = \begin{cases} z, & |z| \leq k, \\ 0, & |z| > k. \end{cases}$$

[2] Estimadores mínimo desvío absoluto (LAD) corresponden a estimadores L_1.

Ejemplo (Media Winsorizada)[3]:

Huber (1981) propuso un compromiso entre la media y la mediana, como:

$$\widetilde{\rho}(z) = \begin{cases} \frac{1}{2}z^2, & |z| \leq k, \\ k|z| - \frac{1}{2}k^2, & |z| > k. \end{cases}$$

El estimador $\widehat{\theta}_{\mathsf{M}}$ es solución de:

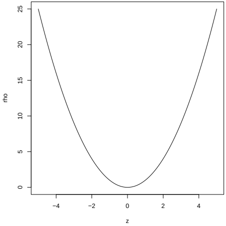
$$\sum_{i=1}^{n} \widetilde{\psi}(x_i - \theta) = 0,$$

donde

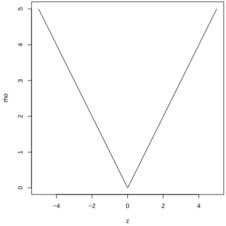
$$\widetilde{\psi}(z) = \begin{cases} -k, & z < -k, \\ z, & |z| \leq k, \\ k, & z > k. \end{cases}$$

[3] Para $k \to 0$ obtenemos la mediana, cuando $k \to \infty$ lleva a la media, mientras que $k = 1.345$ tiene 95% de eficiencia bajo normalidad.

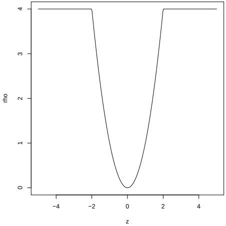
M-estimación



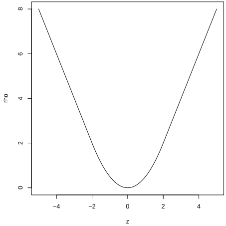
(a) media



(b) mediana



(c) media recortada



(d) media winsorizada

Sabemos que el estimador LS es solución del problema de estimación

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta})^2. \tag{2}$$

Bajo normalidad, el MLE de $\boldsymbol{\beta}$ minimiza la función

$$-\sum_{i=1}^{n} \log f(Y_i; \boldsymbol{\beta}) = \frac{n}{2} \log 2\pi\sigma^2 + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} (Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta})^2. \tag{3}$$

Para obtener estimadores robustos Huber (1981) sugirió substituir el negativo de la función de log-verosimilitud en (3) por una función que permita disminuir el efecto de outliers.

De este modo Huber (1981) propone obtener estimadores tipo-ML, conocidos como M-estimadores resolviendo el problema

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^{n} \rho(Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}). \tag{4}$$

Es usual incorporar el parámetro de escala σ^2 definiendo,

$$z_i = \frac{Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}}{\sigma}, \qquad i = 1, \dots, n,$$

y considere la función objetivo

$$Q_\rho(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} \rho(z_i).$$

De este modo,

$$\frac{\partial Q_\rho(\boldsymbol{\beta})}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \rho(z_i)}{\partial z_i} \frac{\partial z_i}{\partial \beta_j} = \sum_{i=1}^{n} W(z_i) z_i \frac{\partial z_i}{\partial \beta_j}, \qquad W(z_i) = \frac{1}{z_i} \frac{\partial \rho(z_i)}{\partial z_i}.$$

Por tanto el M-estimador de $\boldsymbol{\beta}$ es solución del sistema de ecuaciones

$$\sum_{i=1}^{n} \psi\Big(\frac{Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}}{\sigma}\Big) \frac{x_{ij}}{\sigma} = 0, \qquad j = 1, \dots, p,$$

que puede ser escrito en forma compacta como

$$\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^{n} W_i (Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}) \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{0} \tag{5}$$

Sea $\boldsymbol{W} = \operatorname{diag}(W_1, \dots, W_n)$ de este modo podemos escribir (5) como:

$$\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{W} (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{0}.$$

Sin embargo, debemos resaltar que los pesos W_i dependen de z_i, los que a su vez dependen de $\boldsymbol{\beta}$ y por tanto se requiere métodos iterativos para obtener $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathsf{M}}$.

Usando una estimación inicial $\boldsymbol{\beta}^{(0)}$ podemos usar la iteración

$$\boldsymbol{\beta}^{(r+1)} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{W}^{(r)} \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{W}^{(r)} \boldsymbol{Y}, \tag{6}$$

con

$$\boldsymbol{W}^{(r)} = \operatorname{diag}(W_1^{(r)}, \dots, W_n^{(r)}), \qquad W_i^{(r)} = \psi(e_i^{(r)}/\sigma)/(e_i^{(r)}/\sigma),$$

y

$$\boldsymbol{e}^{(r)} = \boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(r)}.$$

Desde el punto de vista computacional es preferible usar

$$\boldsymbol{\beta}^{(r+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(r)} + \boldsymbol{p}_r,$$

con

$$\boldsymbol{p}_r = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{W}^{(r)} \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{W}^{(r)} \boldsymbol{e}^{(r)}.$$

Observación:

El procedimiento delineado en (6) es conocido como mínimos cuadrados iterativamente ponderados (IRLS).

La convergencia de la iteración en (6) sólo es garantizada para funciones ρ convexas y para funciones de redescenso.

Existe una gran variedad de funciones ρ o ψ para definir M-estimadores, por ejemplo:

- Tukey's biweight

$$\psi(z) = z\big[1 - (t/k)\big]_+^2, \qquad k = 4.685.$$

- Hampel's ψ

$$\psi(z) = \operatorname{sgn}(z) \begin{cases} |z|, & 0 < |z| \leq a, \\ a, & a < |z| \leq b, \\ a(c - |z|)/(c - b), & b < |z| \leq c, \\ 0, & c < |z|, \end{cases}$$

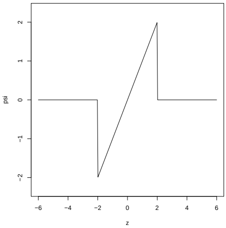
con $a = 1.645$, $b = 3$ y $c = 6.5$.

- Función seno de Andrews

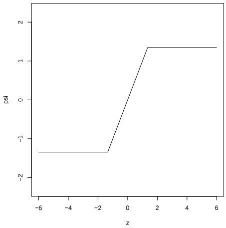
$$\psi(z) = \begin{cases} \sin(z/a), & |z| \leq \pi a, \\ 0, & |z| > \pi a, \end{cases}$$

donde $a = 1.339$.

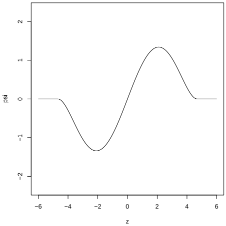
M-estimación



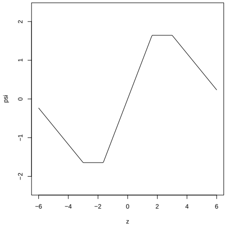
(a) media recortada



(b) Huber



(c) Tukey bisquare



(d) Hampel

Se ha sugerido usar el siguiente estimador para σ,

$$\widehat{\sigma}_{\mathsf{rob}} = \frac{\mathsf{MAD}(\boldsymbol{e})}{0.6745},$$

con

$$\mathsf{MAD}(\boldsymbol{e}) = \mathrm{me}(|\boldsymbol{e} - \mathrm{me}(\boldsymbol{e})|),$$

que es conocido como desviación mediana absoluta de los residuos minimos cuadrados $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathsf{LS}}$.

Análogamente a $\boldsymbol{\beta}$ es posible obtener un M-estimador para σ resolviendo

$$\frac{1}{n-p}\sum_{i=1}^{n}\chi\Big(\frac{Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top\boldsymbol{\beta}}{\sigma}\Big) = \delta,$$

para δ una constante positiva.

Sea

$$\kappa = 1 + \frac{p}{n}\,\frac{\mathsf{var}(\psi')}{\{\mathsf{E}(\psi')\}^2},$$

que es evaluado en la distribución de los errores $\boldsymbol{\epsilon}$ (en la práctica deben ser estimados desde los residuos). Entonces la matriz de covarianza asintótica de $\widehat{\boldsymbol{\beta}}_{\mathsf{M}}$ es dada por (ver Huber, 1981)

$$\kappa^2 \frac{\sum_i \psi^2(e_i)/(n-p)}{[\sum_i \psi'(e_i)/n]^2}(\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1}.$$

Podemos considerar la estimación norma-L_p en la clase de los M-estimadores, como la solución del problema

$$\min_{\beta} \Big(\sum_{i=1}^{n} |Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}|^p \Big)^{1/p}, \qquad p \geq 1. \tag{7}$$

En efecto, basta considerar

$$\rho(z) = |z|^p, \qquad \psi(z) = |z|^{p-2}, \qquad W(z) = |z|^{p-2}.$$

Observación:

Considere $Y_1, \dots, Y_n$ variables aleatorias provenientes de la función de densidad

$$f(y) = c \exp(-|y|^p), \qquad p \geq 1,$$

con c una constante de normalización. La distribución Laplace es obtenida para $p = 1$, mientras que la distribución normal es recuperada para $p = 2$.

Para $1 < p < 2$ podemos usar IRLS como un método para aproximar la solución del problema en (7). En efecto, Osborne (1985)[4] reestableció el problema de estimación norma-L_p como:

$$\min_{\beta} Q_p(\boldsymbol{\beta}), \qquad Q_p(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} |\epsilon_i|^p = \sum_{i=1}^{n} |\epsilon_i|^{p-2}\epsilon_i^2,$$

que puede ser interpretado como un problema de mínimos cuadrados ponderados,

$$\min_{\beta} \|\boldsymbol{W}^{(p-2)/2}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})\|_2^2, \qquad \boldsymbol{W} = \operatorname{diag}(|\epsilon_1|, \dots, |\epsilon_n|).$$

Esto lleva al siguiente algoritmo.

[4] Finite Algorithms in Optimization and Data Analysis. Wiley, New York.

Algoritmo 1: IRLS para estimación L_p.

Entrada: Datos $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{y}$, $p \in [1, 2)$ y estimación inicial $\boldsymbol{\beta}^{(0)}$.

Salida : Aproximación del estimador L_p, $\widehat{\boldsymbol{\beta}}$.

begin

  for $r = 0, 1, 2, \dots$ **do**

    $\boldsymbol{e}^{(r)} = \boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(r)}$

    $\boldsymbol{W}^{(r)} = \operatorname{diag}(|e_1^{(r)}|^{(p-2)/2}, \dots, |e_n^{(r)}|^{(p-2)/2})$

    Resolver $\boldsymbol{p}_r$ desde

    $\min_{\boldsymbol{p}_r} \|\boldsymbol{W}^{(r)}(\boldsymbol{e}^{(r)} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{p}_r)\|_2^2$

    Hacer

    $\boldsymbol{\beta}^{(r+1)} = \boldsymbol{\beta}^{(r)} + \boldsymbol{p}_r$

  end

  return $\widehat{\boldsymbol{\beta}} = \boldsymbol{\beta}^{(\star)}$

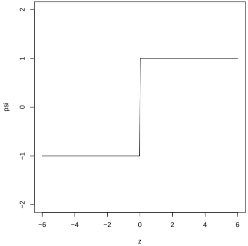
end

Estimación norma-L_1

Para $p = 1$, tenemos

$$\psi(z) = z/|z|.$$

con



De este modo, el procedimiento de estimación norma-L_1 es robusto, con pesos

$$W_i = 1/|e_i|, \qquad i = 1, \dots, n.$$

Estimación norma-L_1

Schlossmacher (1973)[5] propuso usar IRLS para estimación norma-L_1 en regresión basado en la ecuación

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}}{|Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}|} \boldsymbol{x}_i = \mathbf{0}.$$

Sin embargo este procedimiento ha sido fuertemente criticado por una gran cantidad de autores (ver discusión en Capítulo 4 de Björk, 1996)[6].

[5] Journal of the American Statistical Association 68, 857-859.

[6] Numerical Methods for Least Squares Problems. SIAM, Philadelphia.

Estimación norma-L_1

Charnes, Cooper y Ferguson (1955)[7] mostraron que problema de regresión L_1

$$\min_{\beta} Q_1(\boldsymbol{\beta}), \qquad Q_1(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^{n} |Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}|,$$

es equivalente a resolver el siguiente problema de programación lineal (LP)

$$\begin{aligned} &\min \sum_{i=1}^{n} (\epsilon_i^+ + \epsilon_i^-), \\ \text{sujeto a:}\ \ &\epsilon_i^+ \geq 0,\ \ \epsilon_i^- \geq 0, \\ &\epsilon_i^+ - \epsilon_i^- = \epsilon_i = Y_i - \boldsymbol{x}_i^\top \boldsymbol{\beta}, \end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, n$, con ϵ_i^+ y ϵ_i^- variables no negativas.

Observación:

Barrodale y Roberts (1973)[8] presentan un algoritmo de propósito especial para resolver este problema modificando el método simplex y la estructura de datos requerida.

[7] Management Science 1, 138-151

[8] SIAM Journal on Numerical Analysis 10, 839-848.

Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973

```
# carga datos de llamadas
> library(MASS)
> data(phones)

# Ajuste mínimos cuadrados
> f0 <- lm(calls ~ year, data = phones, x = TRUE, y = TRUE)

# Salida
> summary(f0)

Call:
lm(formula = calls ~ year, data = phones)

Residuals:
   Min     1Q Median     3Q    Max
-78.97 -33.52 -12.04  23.38 124.20

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -260.059    102.607  -2.535   0.0189 *
year           5.041      1.658   3.041   0.0060 **

Residual standard error: 56.22 on 22 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.2959,    Adjusted R-squared:  0.2639
F-statistic: 9.247 on 1 and 22 DF,  p-value: 0.005998
```

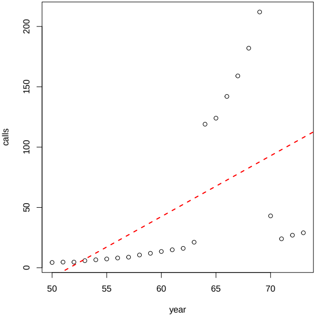
Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973

```
# carga biblioteca L1pack (requiere fastmatrix)
> library(L1pack)

# extrae 'x' e 'y'
> x <- f0$x
> y <- f0$y

# ajuste usando regresión L1
> f1 <- l1fit(x, y, intercept = FALSE)
Warning message:
In l1fit(x, y, intercept = FALSE) : Non-unique solution possible
```

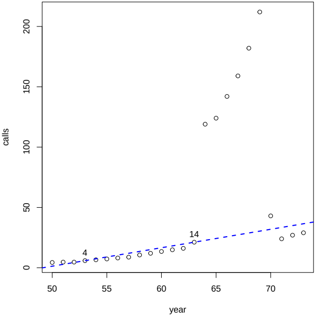
Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973

```
# Salida
> f1
$coefficients
(Intercept)        year
     -75.19        1.53

$minimum
[1] 844

$fitted.values
    1      2      3      4      5      6      7      8      9     10     11
 1.31   2.84   4.37   5.90   7.43   8.96  10.49  12.02  13.55  15.08  16.61
   12     13     14     15     16     17     18     19     20     21     22
18.14  19.67  21.20  22.73  24.26  25.79  27.32  28.85  30.38  31.91  33.44
   23     24
34.97  36.50

$residuals
 [1]    3.09    1.86    0.33    0.00   -0.83   -1.66   -2.39   -3.22   -2.95
[10]   -3.08   -3.11   -3.24   -3.57    0.00   96.27   99.74  116.21  131.68
[19]  153.15  181.62   11.09   -9.44   -7.97   -7.50

$rank
[1] 2

$numIter
[1] 2
```

Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973



(a) estimación LS



(b) estimación L_1

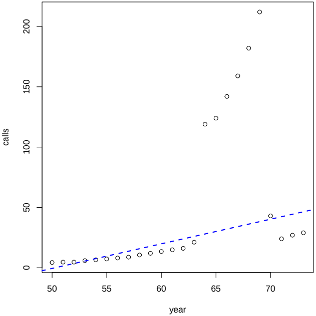
Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973

```
# Huber, k = 1.345
> f2 <- rlm(calls ~ year, data = phones, psi = psi.huber, maxit = 50)
> f2
Call:
rlm(formula = calls ~ year, data = phones, psi = psi.huber, maxit = 50)
Converged in 33 iterations

Coefficients:
(Intercept)        year
 -102.62220     2.04135

Degrees of freedom: 24 total; 22 residual
Scale estimate: 9.03

# Tukey's bisquare, k = 4.685
> f3 <- rlm(calls ~ year, data = phones, psi = psi.bisquare)
> f3
Call:
rlm(formula = calls ~ year, data = phones, psi = psi.bisquare)
Converged in 10 iterations

Coefficients:
(Intercept)        year
 -52.302456    1.098041

Degrees of freedom: 24 total; 22 residual
Scale estimate: 1.65
```

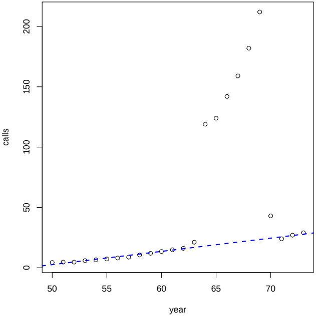
Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973

```
# Salida
> summary(f3)

Call: rlm(formula = calls ~ year, data = phones, psi = psi.bisquare)
Residuals:
     Min       1Q   Median      3Q      Max
 -1.6585  -0.4143   0.2837 39.0866 188.5376

Coefficients:
            Value    Std. Error t value
(Intercept) -52.3025   2.7530   -18.9985
year          1.0980   0.0445    24.6846

Residual standard error: 1.654 on 22 degrees of freedom

# 'pesos' estimados
> f3$w
 [1] 0.8948 0.9667 0.9997 0.9999 0.9949 0.9794 0.9610 0.9280 0.9797
[10] 0.9923 0.9998 0.9983 0.9965 0.4739 0.0000 0.0000 0.0000 0.0000
[20] 0.0000 0.0000 0.0000 0.9105 0.9980 0.9568
```

Llamadas telefónicas en Bélgica 1950-1973



(a) Huber, $k = 1.345$



(b) bisquare, $k = 4.685$