2. tétel

Nagy Dániel

2019. június 22.

Kivonat

Bootstrap módszerek. A maximum likelihood módszer. Hipotézis tesztelés. Extrém statisztikák. Post hoc analízis. Regresszió. Függetlenségvizsgálat. Egzakt tesztek.

1. Bevezetés

1.1. Valószínűségszámítás alapfogalmak

- **Eseménytér** (ez egy abstrakt fogalom): $\Omega = \{\omega_1, \omega_2, ..., \omega_n\}$ pl. kockadobás esetén $\Omega = \{\omega_1 = \text{"1est dobok"}, \omega_2 = \text{"2est dobok"}, \omega_3 = \text{"párosat dobok"}...\}$
- **Valószínűségi változó**: $X : \Omega \to \mathbb{R}$ pl. kockadobás esetén $X(\omega_1) = 1, X(\omega_2) = 2, ...$
- **Valószínűség**: P egy mérték, amely Ω részhalmazaihoz számot rendel:
  - $P : \mathcal{P}(\Omega) \to \mathbb{R}$
  - $P(\Omega) = 1$ és $P(\varnothing) = 0$
  - $0 \leq P(A) \leq 1 \ \forall A \in \Omega$
  - Ha $A_1, A_2, ...$ diszjunkt részhalmazai Ω-nak, akkor

$$P\left(\bigcup_{i=1}^{\infty} A_i\right) = \sum_{i=1}^{\infty} P(A_i)$$

- **Hasznos összefüggések**:
  - $P(A \cup B) = P(A) + P(B) - P(A \cap B)$
  - Két esemény független $\iff P(A \cap B) = P(A)P(B)$
  - $P(A|B) = \frac{P(A \cap B)}{P(B)}$
  - Teljes valószínűség: Ha $A_1, A_2, ...$ az Ω egy felosztása, akkor

$$P(B) = \sum_k P(B|A_k)P(A_k)$$

  - Bayes-tétel: Ha $A_1, A_2, ...$ az Ω egy felosztása, akkor

$$P(A_k|B) = \frac{P(B|A_k)P(A_k)}{P(B)} = \frac{P(B|A_k)P(A_k)}{\sum_j P(B|A_j)P(A_j)}$$

- **Eloszlásfüggvény** (CDF - cumulative distribution function):

$$F_X(x) = P(X < x) = P(\{\omega \in \Omega | X(\omega) < x\})$$

diszkrét esetben

$$F_X(x) = P(X = x) = P(\{\omega \in \Omega | X(\omega) = x\})$$

Ha az X változó F eloszlást követ, akkor így jelöljük: $X \sim F$.

- **Sűrűségfüggvény** (PDF - Probability density function):
  Ha az X változó eloszlásfüggvénye $F_X(x)$, akkor a sűrűségfüggvény definíciója

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^{x} \rho_X(\xi)\mathrm{d}\xi \Longleftrightarrow P(a \leq X(\omega) \leq b) = \int_{a}^{b} \rho_X(x)\mathrm{d}x$$

  Megjegyzés: sűrűségfüggvénye csak folytonos eloszlású valószínűségi változónak van.

- **Várható érték**

$$\text{folytonos eset } E(X) = \langle X \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\rho(x)\mathrm{d}x$$

$$\text{diszkrét eset } E(X) = \langle X \rangle = \sum_k x_k p_k = \sum_k x_k P(X = x_k)$$

- **Várható értékre vonatkozó azonosságok**:
  - Ha $Y = g(X) \Rightarrow E(Y) = E(g(X)) = \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\rho(x)\mathrm{d}x$
  - $E\left(\sum_k a_k X_k\right) = \sum_k a_k E(X_k)$
  - Ha $X_1, X_2, ...$ független változók, akkor $E\left(\prod_k X_k\right) = \prod_k E(X_k)$

- **Variancia** (szórásnégyzet)
  Ha $E(X) = \mu$, akkor a szórásnégyzet a változó és a várható értéke közötti különbség négyzetének várható értéke:

$$\sigma^2(X) = V(X) = E((X-\mu)^2) = \langle (X-\mu)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \mu^2$$

- Ha $X_1, X_2, ...$ függetlenek, akkor

$$\sigma^2\left(\sum_k (a_k X_k + b_k)\right) = \sum_k a_k^2 \sigma^2(X_k)$$

- **Szórás** (standard deviation) definíciója:

$$\sigma(X) = \sqrt{\sigma^2(X)} = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$$

- **Minta**
  Matematikailag egy statisztikai minta megfelel N darab azonos eloszlású, független (iid) változónak egy adott F eloszlásból.

- **Minta átlaga**: $\overline{X} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i$ (p_k-t a relatív gyakorisággal közelítjük)

- **Minta varianciája**: $s^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(X_i - \overline{X})^2$, standard hibája $SE = \sqrt{s^2}$. A nevezőben az $N-1$ faktor az ún. Bessel-korrekció [1].

- **Megjegyzés**: Ha egy teljes populáció esetén $E(X) = \mu$ és $V(X) = \sigma^2$, attól még általában $\overline{X} \neq \mu$ illetve $s^2 \neq \sigma^2$.

- Egy minta esetében $\overline{X}, s^2, SE$ maguk is valószínűségi változók, hiszen minden mintavételezés esetén más-más értéket vehetnek fel. Ezért van értelme arról beszélni, hogy pl. s^2 értéke milyen eloszlást követ. Ha a minta (mérési pontok) iid változók, és $E(X_i) = \mu$, $V(X_i) = \sigma^2$, akkor

$$E(\overline{X}) = \mu$$
$$V(\overline{X}) = \sigma^2/N$$
$$E(s^2) = \sigma^2$$

1.2. Statisztikai következtetés (inference)

- Az alapprobléma: van egy adathalmaz, ami tartalmazza a méréseket. Ezek $X_1, X_2, ..., X_N \sim F$ független, azonos F eloszlást követő valószínűségi változók.

- A statisztikai következtetés feladata, hogy a minta alapján meghatározzuk az F eloszlásfüggvényt. Ezzel ekvivalens, ha F helyett a ρ sűrűségfüggvényt határozzuk meg.

- Ehhez használhatunk parametrikus és nem-parametrikus modelleket. A parametrikus modell egy olyan $\mathcal{F}$ halmaz, ami a lehetséges PDF-eket tartalmazza:

$$\mathcal{F} = \{\rho(x|\theta) : \theta \in \Theta\},$$

  ahol Θ a lehetséges paraméterek halmaza. Pl. ha normális eloszlást feltételezünk, akkor a parametrikus modell

$$\mathcal{F} = \left\{\rho(x|\mu,\sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) : \mu \in \mathbb{R}, \sigma > 0\right\},$$

  a feladat pedig μ és σ meghatározása. Nem-parametrikus modellek azok, amelyeket nem lehet véges számú valós paraméterrel definiálni, pl. $\mathcal{F} = \{\text{az összes létező PDF}\}$.

- **bias** Egy becsült $\hat{\theta}$ paraméter esetén a bias (előítélet, torzítás) alatt a becsült paraméter várható értéke és a valódi értéke közötti különbséget értjük [2]:

$$Bias(\hat{\theta}) = E(\hat{\theta}) - \theta$$

2. Bootstrap módszerek [3]

A Bootstrap módszerek arra jók, hogy egy statisztikai minta esetén meghatározzuk a mérés pontosságát. A módszer lényege a következő: ahhoz, hogy az adott mérendő paraméter (pl. átlag) hibáját meg tudjuk mondani, ismerni kellene a populáció adott paraméterét. Mivel ezt nem ismerjük, ezért a paraméter mérésének hibáját úgy becsüljük, hogy a meglévő mintából

sokszor újramintavételezünk, majd az újbóli mintavételezések alapján számítjuk ki a hibát. Ezzel az eljárással egy becslést kapunk az adott paraméter eloszlására. Tehát a bootstrap módszer azzzal a feltételezéssel él, hogy a (minta → populáció) következtetés egyenértékű az (újramintavételezés → minta) következtetéssel.
Példa. arra vagyunk kíváncsiak, hogy Magyarországon átlagosan milyen magasak az emberek. Mivel nem tudunk megmérni mindenkit, ezért kiválasztunk 1000 embert és lemérjük a magasságukat. Az átlagra a $\hat{\mu}$ értéket kapjuk. A kérdés az, hogy ez a $\hat{\mu}$ érték mennyiben tér el a valós μ értéktől? A választ úgy keressük, hogy az 1000 adatból véletlenszerűen újra mintavételezünk, így lesz sok $\hat{\mu}_i$ átlagunk és erre már kiszámíthatjuk a $V(\hat{\mu})$ szórást.

2.1. Jackknife módszer [4]

A Jackknife egy olyan mintavételezési módszer, melynek segítségével különböző statisztikai paraméterek határozhatók meg, mint pl. a variancia és a bias. A Jackknife módszer lényege, hogy az adott mintából mindig kihagyunk egy elemet, majd az így keletkező mintára újra kiszámoljuk az adott paramétert. Így kapunk egy eloszlást a becsült paraméterre, amelyből pontosabb eredményt kaphatunk.
Példa. A populáció átlagot akarjuk megbecsülni egy n elemű mintából. Ehhez kiszámoljuk minden $n-1$ elemű almintából az $\overline{x}_i$ átlagokat:

$$\overline{x}_i = \frac{1}{n-1} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} x_j$$

Ezután az átlag becslése az előbb kapott értékek átlaga:

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \overline{x_i}$$

A Jackknife módszer alapján a becslés varianciája:

$$V(\overline{x}) = \frac{n-1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\overline{x}_i - \overline{x})^2$$

3. Maximum likelihood

A maximum likelihood módszer egy olyan becslési eljárás, amelynek segítségével egy parametrikus modell paramétereinek értékét próbáljuk a minta alapján meghatározni. Ehhez felírjuk az ún. likelihood-függvényt, ami azt fejezi ki, hogy a mért adatok esetén mekkora a valószínűsége a θ paramétereknek. Ha a változó elposzlása ismert, akkor ezzel megadható a likelihood függvény:

$$\text{diszkrét változóra: } \mathcal{L}(\theta) = P(X = x|\theta)$$
$$\text{folytonos változóra: } \mathcal{L}(\theta) = \rho(x|\theta)$$

A gyakorlatban sokszor a log-likelihood függvényt vagy az átlagolt log-likelihood függvényt használjuk:

$$\ell(\theta|x) = \ln \mathcal{L}(\theta|x)$$
$$\hat{\ell}(\theta|x) = \frac{1}{N} \ln \mathcal{L}(\theta|x)$$

A maximum likelihood módszer lényege, hogy megkeressük azt a θ paramétert, ami a likelihood függvényt maximalizálja:

$$\hat{\theta}_{MLE} = \underset{\theta \in \Theta}{\operatorname{argmax}} \mathcal{L}(\theta | x_1, x_2, ..., x_N)$$

Példa: normális eloszlás paraméterei

$$\rho(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Ezért egy N elemű minta esetén azt feltételezve, hogy a mintát egy normális eloszlást követő populációból vesszük, az N minta sűrűségfüggvénye:

$$\rho(x_1, x_2, ..., x_N|\mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{N} \rho(x_i|\mu, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{n/2} \exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) = \mathcal{L}(\mu, \sigma^2)$$

A log-likelihood függvény pedig

$$\ell(\mu, \sigma^2) = \ln \mathcal{L}(\mu, \sigma^2) = -\frac{N}{2}\ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2$$

Ahhoz, hogy megkapjuk a $\hat{\mu}_{MLE}$ és $\hat{\sigma}_{MLE}$ becsült paramétereket, az alábbi két egyenletet kell megoldani:

$$\frac{\partial \ell(\mu, \sigma^2)}{\partial \mu} = 0$$
$$\frac{\partial \ell(\mu, \sigma^2)}{\partial \sigma} = 0$$

Ha ezeket megoldjuk, az jön ki, hogy $\hat{\mu}_{MLE} = \overline{x} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i$ és $\hat{\sigma}^2_{MLE} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2$.

4. Extrém statisztikák

Az extrém statisztikák (extrémérték-elméletek) olyan események modellezésére alkalmazhatók, amelyek extrém ritkán fordulnak elő: pl. szökőár, tőzsdei összeomlás, 100 éves hőmérsékleti rekord, stb. [5].
Egy egyszerű egyváltozós modell a következő képpen írható le: Legyen I_n annak a valószínűsége, hogy n esemény során bekövetkezik az extrém érték. Ezt úgy modellezzük, hogy veszünk $X_1, ..., X_n$ iid változót az F eloszlásból. Ekkor $M_n = \max(X_1, ..., X_n)$ esetén:

$$P(M_n <\leq z) = P(X_1 \leq z, ..., X_n \leq z) = (F(z))^n$$

Az $I_n = I_n(M_n \geq z)$ így binomiális eloszlást követ, amelyre $p(z) = 1 - (F(z))^n$. Az egy extrém esemény bekövetkezéséhez szükséges próbálkozások száma pedig geometriai eloszlást követ ugyanezzel a $p(z)$ paraméterrel.[6]

5. Post-hoc analízis

A post-hoc analízis azt jelenti, hogy csak azután választjuk ki a teszt statisztikát, miután már az adatokat ismerjük. ("post-hoc" = "ez után"). Ez a módszer többféle problémához vezethet, bővebben: [7, 8]

6. Regresszió

Tegyük fel, hogy a megfigyelt adathalmaz $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_N, y_N)\}$. Ekkor az X a független változó (feature variable, predictor, regressor), Y pedig a függő változó (outcome, response variable). Az $r(X)$ ***regressziós függvény*** az Y várható értéke X függvényében:

$$r(x) = E(Y|X = x)$$

- Ha $r(x)$ megadható véges számú valós paraméterrel, akkor **parametrikus regresszió**ról beszélünk.
- Ha Y meghatárzása a cél, ismert X esetén, akkor **predikció**ról beszzélünk.
- Ha Y diszkrét (pl. kutya vagy macska látható a képen), akkor **klasszifikáció**ról beszélünk.
- Ha a cél az $r(x)$ görbe meghatározása, akkor **regresszió**ról vagy **görbeillesztés**ről beszélünk.

7. Hipotézistesztelés

A hipotézistesztelés lényege, hogy a rendelkezésre álló adatok alapján egy feltevés (hipotézis) igazságtartalmára akarunk kijelentést tenni. Fontos, hogy a feltevés a teljes populációra vonatkozik, tehát egy hipotézis elfogadásának vagy elutasításának mindig van valamennyi bizonytalansága. Példák: 1. Dobunk egy dobókockával 100-szor, majd feltesszük azt a hipotézist, hogy a dobott számok egyenletes eloszlást követnek. 2. Megnézzük 1000 ember jövedelmét majd feltételezzük, hogy a jövedelem olyan lognormális eloszlást követ, amelyre $\mu = 150000$HUF és $\sigma = 50000$HUF.
Formális definíció:

- A Θ paraméter-teret felosztjuk Θ_0 és Θ_1-re. ($\Theta_0 \cup \Theta_1 = \Theta$, $\Theta_0 \cap \Theta_1 = \varnothing$)
- A **nullhipotézis** $H_0 : \theta \in \Theta_0$
- Az **alternatív hipotézis** $H_1 : \theta \in \Theta_1$
- Az összegyűjtött $X \in \mathcal{X}$ adatok alapján akarjuk a hipotézist eldönteni.
- Az elvetési régió (rejection region) egy $R \subset \mathcal{X}$ halmaz, amelyre

$$X \in R \Rightarrow H_0\text{-t elvetjük és elfogadjuk } H_1\text{-et}$$
$$X \notin R \Rightarrow H_0\text{-t elfogadjuk}$$

- Egy tesztfüggvény (test statistic) egy $T : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$ függvény, amelyre az elvetési régió így írható:
$$R = \{x \in \mathcal{X} | T(x) > c\},$$
ahol c a teszt kritikus értéke.

- A hipotézis tesztelés lényege keresni egy olyan T-t és c-t, amivel a legjobb (legkevésbé káros) döntést hozhatjuk.

- **Egyoldalú teszt**: Ha X a rendelkezésre álló adathalmaz, és $\theta \in \Theta$ egy paraméter (pl. átlag, variancia, stb), akkor egy egyoldalú teszt a következőt jelenti:
$$H_0 : \theta = \theta_0 \text{ és } H_1 : \theta < \theta_0 \text{ (vagy } > \theta_0)$$

- **Kettős hipotézisteszt**: Ha X a rendelkezésre álló adathalmaz, és $\theta \in \Theta$ egy paraméter (pl. átlag, variancia, stb), akkor egy kettős teszt a következőt jelenti:
$$H_0 : \theta = \theta_0 \text{ és } H_1 : \theta \neq \theta_0$$

- **Hibák**

	H_0 igaz	H_0 hamis
Elfogadjuk H_0-t	OK	type 2 hiba (false positive)
Elvetjük H_0-t	type 1 hiba (false negative)	OK

1. ábra. A két hibatípus.

- **Statisztikai erő**: Egy kettős hipotézisteszt statisztikai ereje nem más, mint az a valószínűség, hogy a teszt helyesen veti el a nullhipotézist, amikor az alternatív hipotézis igaz:
$$\text{statisztikai erő} = \beta = P(H_0 \text{ elutasítva} \,|\, H_1 \text{ igaz})$$

- **szignifikancia-szint** Egy statisztikai teszt α szignifikancia szintű, ha a nullhipotézis elvetésének a valószínűsége α feltéve, hogy a nullhipotézis igaz.
$$\alpha = P(H_0\text{-t elvetjük} \,|\, H_0 \text{ igaz})$$

- **p-érték**: A p-érték azt mutatja meg, hogy ha igaz a nullhipotézis, akkor mekkora valószínűséggel kapunk olyan eredményt, amely legalább annyira extrém, mint a mért eredmény. Pl. Ha egy minta átlaga $\overline{X}$, akkor a $p = 5\%$ azt jelenti, hogy ha a populáció átlaga μ, akkor 5% valószínűséggel mérhetek legalább $|\overline{X} - \mu|$ eltérést. A p-értéket így is definiálhatjuk:

$$p = P(\text{ezt az eredményt mérem} \,|\, H_0 \text{ igaz})$$

7.1. Egymintás u-próba [9]

(angolul z-test [10])

- Egymintás u-próbával a minta alapján a populáció átlagára vonatkozó hipotézist lehet tesztelni.
- A populációt normális eloszlásúnak feltételezzük, melynek ismerjük a σ szórását.
- Ha a σ szórás nem ismert, akkor a u-próba helyett t-próbát kell végezni.
- Azt akarjuk megvizsgálni, hogy a minta alapján a μ érték tekinthető-e a populáció átlagának.
- A teszt elvégzéséhez kiszámoljuk a minta $\overline{X}$ átlagát, majd ebből a próbastatisztikát:

$$u = \frac{\overline{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}}$$

- Kihasználjuk azt a feltételt, hogy az u próbastatisztika standard normális eloszlást követ, és adott előre meghatározott p-értékre kiszámoljuk a $u_{p/2} = \Phi^{-1}(1 - p/2)$-t.
- Ha $|u| \geq u_{p/2}$, akkor ez azt jelenti, hogy a mért $\overline{X}$ és a feltételezett μ érték között p szignifikancia-szint mellett az eltérés szignifikáns. Tehát elvetjük a nullhipotézist, miszerint a populáció átlaga μ.
- **Példa:** Begyűjtünk 3 tonna almát, amiről tudjuk, hogy az almák tömegének szórása $\sigma = 40g$. Találomra kiválasztunk 100db almát, amelyeket megmérve azt kapjuk, hogy a tömegek átlaga $\overline{X} = 150g$. Kijelenthető-e 95%-os biztonsággal, hogy a begyűjtött almák átlagos tömege $\mu = 140g$? És 99%-os biztonsággal?
  - $H_0 : \mu = 140g$
  - $H_1 : \mu \neq 140g$
  - $p_1 = 0.05$, $p_2 = 0.01$
  - $u_{p_1/2} = \Phi^{-1}(1 - p_1/2) = \Phi^{-1}(1 - 0.05/2) \approx 1.96$
  - $u_{p_2/2} = \Phi^{-1}(1 - p_2/2) = \Phi^{-1}(1 - 0.01/2) \approx 2.58$
  - $u = \dfrac{\overline{X} - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} = \dfrac{150 - 140}{40/10} = 2.5$
  - WTF???

7.2. Egymintás t-próba [11]

- A vizsgált valószínűségi változó normális eloszlást követ, de nem ismerjük a σ szórást.
- A kérdés ugyanaz, mint az előbb, hogy a populáció átlaga megegyezik-e statisztikai szempontból a feltételezett μ értékkel.
- t-próba esetén a próbastatisztika a következő lesz:

$$t = \frac{\overline{X} - \mu}{s/n},$$

ahol $s = \sqrt{\frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \overline{X})^2}$ a minta szórása. A próbastatisztika ebben az esetben Student t-eloszlást követ, $f = n - 1$ szabadsági fokkal.

- Az előbbihez hasonlóan az adott p szignifikancia szinthez megkeressük a t_p értéket.
- Ha $|t| \geq t_p$, akkor a nullhipotézist elvetjük, mert a minta átlaga szignifikánsan eltér a μ értéktől.
- Ellenkező esetben, vagyis ha $|t| < t_p$, a nullhipotézist megtartjuk.

8. Függetlenségvizsgálat, χ^2-próba

Hivatkozások

[1] Bessel's correction https://en.wikipedia.org/wiki/Bessel%27s_correction.

[2] Bias of an estimator https://en.wikipedia.org/wiki/Bias_of_an_estimator.

[3] Bootstrapping Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/Bootstrapping_(statistics).

[4] Jackknife resampling https://en.wikipedia.org/wiki/Jackknife_resampling.

[5] Extrémérték-elmélet https://hu.wikipedia.org/wiki/Extrémérték-elmélet.

[6] Extreme value theory https://en.wikipedia.org/wiki/Extreme_value_theory#Univariate_theory.

[7] Post hoc analysis https://en.wikipedia.org/wiki/Post_hoc_analysis.

[8] Data dredging https://en.wikipedia.org/wiki/Data_dredging.

[9] Egymintás u-próba https://hu.wikipedia.org/wiki/Egymintás_u-próba.

[10] Z-test https://en.wikipedia.org/wiki/Z-test.

[11] Egymintás t-próba https://hu.wikipedia.org/wiki/Egymintás_t-próba.