R per l'analisi statistica multivariata

Unità M: proprietà degli stimatori

Tommaso Rigon

Università Milano-Bicocca

Unità M

Argomenti affrontati

- Distribuzione di uno stimatore
- Distorsione, varianza ed errore quadratico medio
- Normalità asintotica
- QQ-plot

- Esercizi **R** associati: `https://tommasorigon.github.io/introR/exe/es_4.html`

Inferenza statistica parametrica (recap)

- In questa unità discuteremo di **stimatori** e delle loro proprietà.
- Ricordiamo che, nel caso assolutamente continuo, un **modello statistico** è una collezione di funzioni di densità

$$\mathcal{F} = \{f(\cdot;\theta) : \theta \in \Theta\},$$

  indicizzata da un vettori di parametri $\theta \in \Theta$, dove $\Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ è lo **spazio parametrico**.
- Assumiamo inoltre che i dati $y_1, \ldots, y_n$ siano realizzazioni iid di variabili aleatorie $Y_1, \ldots, Y_n$ con legge $f(y;\theta)$, per un qualche **ignoto** valore del parametro θ.
- **Obiettivo**. Il nostro scopo è stimare l'ignoto valore di θ nel miglior modo possibile usando i **dati** osservati $y = (y_1, \ldots, y_n)$.

Stime e stimatori (recap)

- Uno **stimatore** $\hat{\theta}(Y)$ è una qualsiasi funzione delle variabili aleatorie $Y = (Y_1, \ldots, Y_n)$ che "si avvicina" al vero valore di θ. Lo stimatore è una **variabile aleatoria**.
- Una **stima** $\hat{\theta} = \hat{\theta}(y)$ è una qualsiasi funzione dei dati $y = (y_1, \ldots, y_n)$ che "si avvicina" al vero valore di θ. La stima è la realizzazione di $\hat{\theta}(Y)$, perciò è un **numero**.
- Abbiamo bisogno di **criterio** per stabilire se uno stimatore "funziona" o meno. Il sostegno logico e filosofico proviene dal seguente principio (**frequentista**).

Il principio del campionamento ripetuto

- Immaginiamo che sia possibile, almeno ipoteticamente, **ripetere l'esperimento** varie volte, ottenendo ogni volta un nuovo campione y e quindi una nuova stima $\hat{\theta}$.
- Di conseguenza, lo stimatore $\hat{\theta}(Y)$ è una variabile aleatoria, per la quale possiamo parlare di distribuzione, valore atteso e così via.

Il principio del campionamento ripetuto (recap)

- Se accettiamo il principio del campionamento ripetuto, valuteremo le bontà della singola stima $\hat{\theta}$ sulla base delle **proprietà dello stimatore** $\hat{\theta}(Y)$.
- In altri termini, ci chiediamo come si comporterebbero le varie stime $\hat{\theta}$ se potessimo osservare tanti campioni, non solo quello che abbiamo a disposizione.
- Ci aspettiamo che **mediamente** la distribuzione di $\hat{\theta}(Y)$ sia **concentrata** attorno al vero ed ignoto valore θ. Ovviamente, questo non è assicurato campione per campione.
- Una proprietà tipicamente richiesta è che all'aumentare della dimensione del campione n, la distribuzione di $\hat{\theta}(Y)$ sia **concentrata** attorno a θ.

Distorsione, varianza ed errore (recap)

- Una prima semplice aspettativa rispetto allo stimatore è che mediamente esso sia corretto o **non distorto**, ovvero

$$\mathbb{E}\{\hat{\theta}(Y)\} = \theta, \qquad \theta \in \Theta.$$

- La **distorsione** è infatti definita come la differenza semplice

$$\text{BIAS}\{\hat{\theta}(Y)\} := \mathbb{E}\{\hat{\theta}(Y)\} - \theta, \qquad \theta \in \Theta.$$

  Se uno stimatore è non distorto allora ovviamente $\text{BIAS}\{\hat{\theta}(Y)\} = 0$.

- Un requisito un po' meno stringente è che lo stimatore sia **asintoticamente non distorto**, ovvero

$$\lim_{n \to \infty} \mathbb{E}\{\hat{\theta}(Y)\} = \theta, \qquad \theta \in \Theta,$$

  dove n è la dimensione campionaria.

Distorsione, varianza ed errore (recap)

- La non-distorsione (asintotica) è una proprietà auspicabile, ma spesso meno importante dello **errore** o **scarto quadratico medio**.

- Lo scarto quadratico medio (**mean squared error**) misura la distanza media tra stimatore e vero valore del parametro, ovvero

$$\text{MSE}\{\hat{\theta}(Y)\} = \mathbb{E}\left\{\left[\hat{\theta}(Y) - \theta\right]^2\right\}, \qquad \theta \in \Theta.$$

- **Esercizio - proprietà**. Dimostrare che vale la seguente scomposizione:

$$\text{MSE}\{\theta(Y)\} = \text{var}\left\{\hat{\theta}(Y)\right\} + \text{BIAS}\left\{\hat{\theta}(Y)\right\}^2, \qquad \theta \in \Theta.$$

- **Nota**. Se una stimatore è non-distorto, allora il suo scarto quadratico medio coincide con la varianza dello stimatore.

Consistenza (recap)

- Uno stimatore si dice **consistente in media quadratica** se

$$\lim_{n\to\infty} \text{MSE}\{\theta(Y)\} = 0, \qquad \theta \in \Theta.$$

  oppure equivalentemente se

$$\lim_{n\to\infty} \mathbb{E}\{\hat{\theta}(Y)\} = \theta, \quad \lim_{n\to\infty} \text{var}\{\hat{\theta}(Y)\} = 0, \qquad \theta \in \Theta.$$

- La consistenza in media quadratica implica la **convergenza in probabilità**, per cui scriveremo che

$$\hat{\theta}(Y) \xrightarrow{p} \theta, \qquad n \to \infty, \qquad \theta \in \Theta.$$

- **Esercizio**. Lo studente è invitato a rivedersi la definizione di convergenza in probabilità, le sue proprietà e la sua relazione con la consistenza in media quadratica (in L^2).

- **Nota linguistica**. Il termine "consistente" deriva da un'errata traduzione del termine inglese *consistent*. Purtroppo, l'uso del termine è ormai troppo consolidato per porvi rimedio e non resta che subirlo. Lo stesso può dirsi del termine "stima puntuale".

Inferenza statistica e metodi Monte Carlo

- Stabiliti i criteri per valutare la bontà di uno stimatore, rimane da capire come utilizzarli in pratica.
- Nei corsi di Statistica II vengono presentati modelli e stimatori per i quali è possibile calcolare l'MSE analiticamente. Questo capita di rado nelle **applicazioni reali**.
- Fortunatamente il metodo **Monte Carlo** che abbiamo visto nell'**unità I** può venire in aiuto in assenza di risultati analitici.
- Ad esempio, lo scarto quadratico medio è per definizione un valore atteso, che possiamo quindi approssimare tramite **integrazione Monte Carlo**.

Modello gaussiano con varianza nota

- Sia $y = (y_1, \ldots, y_n)$ un campione iid da una variabile casuale normale con **media ignota** μ e **varianza nota** e pari $\sigma^2 = 16$, ovvero $Y \sim \mathrm{N}(\mu, 16)$.
- Il parametro μ è **ignoto** e siamo interessati a stimarlo.
- Uno stima naturale per μ, che oltretutto coincide con la SMV, è la media aritmetica

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

- La distribuzione (esatta!) dello stimatore $\hat{\mu}(Y)$ è nota ed è pari

$$\hat{\mu}(Y) \sim \mathrm{N}\left(\mu, \frac{16}{n}\right).$$

- **Esercizio**. Si dimostri che $\mathrm{MSE}\{\hat{\mu}(Y)\} = 16/n$. Se ne deduca che lo stimatore è consistente.

Modello gaussiano con varianza nota

- Un secondo possibile stimatore per μ è la **mediana** campionaria Me.
- La **distribuzione dello stimatore** Me(Y) è ignota. Di conseguenza, anche le relative proprietà sono ignote.
- La mediana è uno stimatore distorto? Il suo scarto è maggiore o minore di quello della media aritmetica?
- In assenza di risultati analitici, possiamo provare a fornire una **risposta parziale** tramite Monte Carlo.
- In altri termini, indagheremo quale stimatore funziona meglio per degli specifici valori di μ, ad esempio $\mu = 10$ oppure $\mu = 15$.

Modello gaussiano con varianza nota

- Supponiamo di voler investigare il caso $\mu = 10$. Supponiamo inoltre che $n = 20$.
- Cominciamo simulando un singolo campione $y_1, \ldots, y_n$ da una distribuzione $\mathrm{N}(\mu, 16)$.

```r
set.seed(100)
n <- 20 # Numerosità campionaria
mu <- 10 # Media teorica (solitamente ignota)

# Campione y_1,...,y_n
y <- rnorm(n, mean = mu, sd = sqrt(16))

# Vero valore è mu = 10
mean(x)
# [1] 10.43147
median(x)
# [1] 10.37232
```

- In questo caso specifico, la mediana si avvicina di più al vero valore della media ($\mu = 10$). Tuttavia, questo vale per questo **specifico campione**.

Modello gaussiano con varianza nota

- Coerentemente con quanto discusso nelle slides precedenti, un modo preciso per valutare la bontà dello stimatore si basa sul **campionamento ripetuto**.
- In altri termini, vogliamo confrontare gli **scarti quadratici medi** dei due stimatori

$$\text{MSE}\{\hat{\mu}(Y)\}, \qquad \text{MSE}\{\text{Me}(Y)\}.$$

- Nel caso della media aritmetica con $\sigma^2 = 16$ ed $n = 20$ i conti analitici implicano che $\text{MSE}\{\hat{\mu}(Y)\} = 16/20 = 0.8$. Ma nel caso della mediana?
- Utilizzando il metodo Monte Carlo, ottengo una **stima** dello scarto quadratico medio dello **stimatore** mediana (**!!**), ovvero

$$\widehat{\text{MSE}\{\text{Me}(Y)\}}.$$

- **Esercizio**. Lo studente rilegga questa frase fino a convincersi della sua correttezza.

Modello gaussiano con varianza nota

- L'approssimazione $\widehat{\text{MSE}\{\text{Me}(Y)\}}$ si basa sul metodo di integrazione Monte Carlo.
- Si supponga che $\text{Me}_1, \ldots, \text{Me}_R$ siano R estrazioni casuali della mediana calcolata su un campione iid gaussiano ($\mu = 10$, $\sigma^2 = 16$) di dimensione $n = 20$.
- Possiamo ottenere $\text{Me}_1, \ldots, \text{Me}_R$ simulando R campioni Y e calcolandone la mediana:

```
set.seed(156)
R <- 10^5
# Ottengo R estrazioni della mediana campionaria Me_1,...Me_R
median_hat <- replicate(R, median(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(16))))
```

- L'**approssimazione Monte Carlo** è quindi pari a

$$\widehat{\text{MSE}\{\text{Me}(Y)\}} = \frac{1}{R}\sum_{r=1}^{R}(\text{Me}_r - \mu)^2 \approx \mathbb{E}\{(\text{Me}(Y) - \mu)^2\} = \text{MSE}\{\text{Me}(Y)\}.$$

```
mean((median_hat - mu)^2) # Stima dello scarto quadratico medio (MSE) della mediana
# [1] 1.172079
```

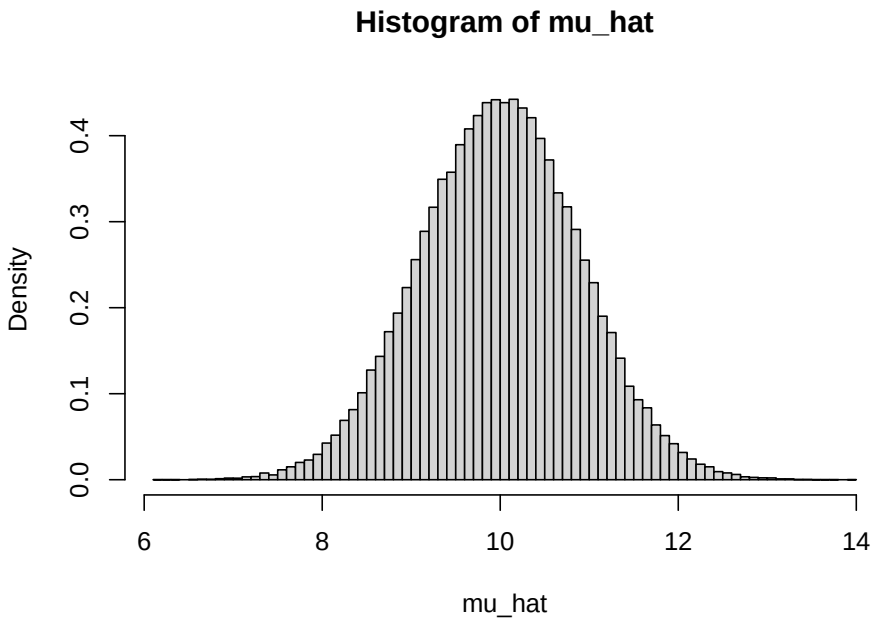
Modello gaussiano con varianza nota

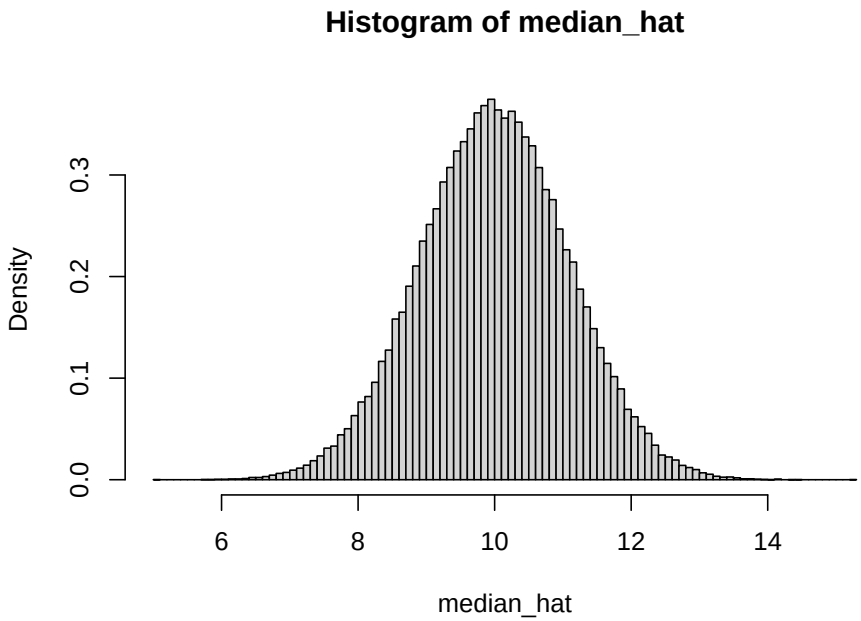
- La mediana sembra essere **meno efficiente** della media aritmetica, quantomeno se $\mu = 10, \sigma^2 = 16$ ed $n = 20$.

- Nel seguito sono riportati alcuni risultati aggiuntivi, incluse le stime Monte Carlo relative alla media aritmetica.

```r
set.seed(156)
R <- 10^5

mu_hat <- replicate(R, mean(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(16))))
median_hat <- replicate(R, median(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(16))))

mean(mu_hat) - mu # Distorsione dello stimatore; valore teorico: 0
# [1] -0.004089293
mean((mu_hat - mu)^2) # Scarto quadratico medio dello stimatore; valore teorico: 0.8
# [1] 0.8008738

mean(median_hat) - mu # Distorsione dello stimatore; valore teorico: ??
# [1] -0.001820327
mean((median_hat - mu)^2) # Scarto quadratico medio dello stimatore; valore teorico: ??
# [1] 1.172248
```

Distribuzione degli stimatori






```r
par(mfrow = c(1, 2))
hist(mu_hat, breaks = 100, freq = F)
hist(median_hat, breaks = 100, freq = F)
```

Commenti conclusivi

- Le approssimazioni coinvolte in questa ultima discussione sono di due **differenti tipologie**.
- Da un lato abbiamo la **variabilità** di $\hat{\theta}$, che è legata ai dati $y_1, \ldots, y_n$ e alla loro numerosità campionaria n.
- Dall'altro abbiamo la **variabilità Monte Carlo** di $\widehat{\text{MSE}\{\theta(Y)\}}$, che è invece legata alle repliche Monte Carlo e al numero di simulazioni R.
- Questi due concetti sono ben distinti e non vanno confusi tra loro.
- Inoltre, mentre aumentare il numero di simulazioni R è sempre possibile (basta aspettare più tempo), non sempre disponiamo di dati aggiuntivi.

Esercizio riassuntivo (da fare a casa)

- Si supponga che $Y_1, \ldots, Y_n$ sono variabili aleatorie iid distribuite come un normale di media nota $\mathbb{E}(Y_1) = 0$, con $n = 20$.
- La varianza σ^2 è **ignota** e siamo interessati a stimarla.
- Si calcolino tramite simulazione la **distorsione** e l'**errore quadratico** dei seguenti stimatori della varianza, quando $\sigma^2 = 16$:

$$S_1^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2, \qquad S_2^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2,$$

$$S_3^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Y_i^2, \qquad S_4 = \frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - \bar{Y})^2.$$

Schema della soluzione

```r
set.seed(520)
R <- 10^5; n <- 20
mu <- 0; sigma2 <- 16

# Definisco le funzioni che calcolano gli stimatori
var1 <- function(x) mean(x^2) - mean(x)^2
var2 <- function(x) var(x) # Coincide con la definizione di R
var3 <- function(x) mean(x^2)
var4 <- function(x) (length(x) - 1) / (length(x) + 1) * var(x)

# Esecuzione della simulazione
S2_1 <- replicate(R, var1(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(sigma2))))
S2_2 <- replicate(R, var2(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(sigma2))))
S2_3 <- replicate(R, var3(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(sigma2))))
S2_4 <- replicate(R, var4(rnorm(n = n, mean = mu, sd = sqrt(sigma2))))

# Distorsioni (approssimate)
round(mean(S2_1 - sigma2), 2)
round(mean(S2_2 - sigma2), 2)
round(mean(S2_3 - sigma2), 2)
round(mean(S2_4 - sigma2), 2)

# Errore quadratico medio (approssimato)
mean((S2_1 - sigma2)^2)
mean((S2_2 - sigma2)^2)
mean((S2_3 - sigma2)^2)
mean((S2_4 - sigma2)^2)
```

Consistenza I

- Sia $y_1, \ldots, y_n$ un campione iid da una distribuzione uniforme in $(0, \theta)$, dove $\theta > 0$ è un parametro ignoto. La stima di massima verosimiglianza in questo caso è pari a

$$\hat{\theta}_n = \max\{X_1, \ldots, X_n\}.$$

- Vogliamo verificare tramite simulazione se lo stimatore è **consistente**, ovvero se

$$\hat{\theta}(Y) \xrightarrow{p} \theta.$$

- In pratica, ciò che possiamo fare è simulare alcuni valori di $\hat{\theta}$ per valori di n crescenti e controllare se questi si avvicinano sempre più a θ.

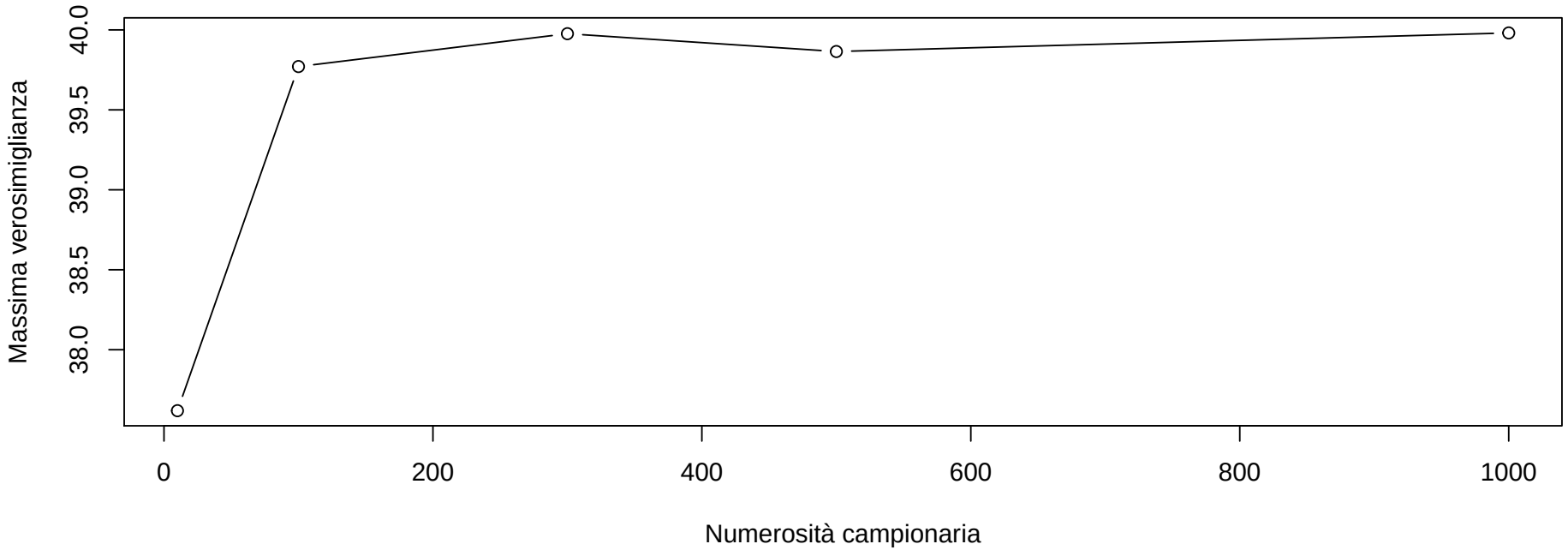
Consistenza II

- Supponiamo che il **vero valore** del parametro sia $\theta = 40$.

```
theta0 <- 40

# Numerosità campionarie
nn <- c(10, 100, 300, 500, 1000)

# Stime di massima verosimiglianza
set.seed(123)
theta_hat <- c(
  max(runif(nn[1], min = 0, max = theta0)),
  max(runif(nn[2], min = 0, max = theta0)),
  max(runif(nn[3], min = 0, max = theta0)),
  max(runif(nn[4], min = 0, max = theta0)),
  max(runif(nn[5], min = 0, max = theta0))
)
theta_hat
# [1] 37.61869 39.77079 39.97618 39.86469 39.98096
```

- All'aumentare di n, lo stimatore **tende** a diventare sempre più preciso. Per valori di n ancora maggiori di 1000, la precisione aumenta ulteriormente.

Consistenza III




```r
plot(nn, theta_hat,
  type = "b",
  xlab = "Numerosità campionaria",
  ylab = "Massima verosimiglianza"
)
```

Approssimazioni asintotiche (recap)

- In problemi di stima sufficientemente regolari, spesso capita che la distribuzione di uno stimatore sia **approssimativamente normale**, per n elevato.

- Si supponga che $\Theta = \mathbb{R}$ e che $\hat{\theta}(Y)$ sia lo **stimatore di massima verosimiglianza**.

- Sotto opportune **condizioni di regolarità** vale la seguente **convergenza debole**

$$\sqrt{n}\frac{\hat{\theta}(Y) - \theta}{i_1(\theta)^{-1/2}} \xrightarrow{d} N(0,1), \qquad n \to \infty,$$

dove $i_1(\theta)$ rappresenta l'**informazione attesa** del modello $f(y;\theta)$, ovvero

$$i_1(\theta) = \mathbb{E}\left\{\left(\frac{\partial}{\partial\theta}\log f(Y;\theta)\right)^2\right\} = -\mathbb{E}\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\log f(Y;\theta)\right).$$

- Informalmente, useremo la seguente notazione

$$\hat{\theta}(Y) \dot{\sim} \mathrm{N}\left(\theta, \frac{i_1(\theta)}{n}\right),$$

per indicare che $\hat{\theta}(Y)$ è **asintoticamente distribuito** come una normale.

Approssimazioni asintotiche: esempio

- Siano $Y_i \overset{\text{iid}}{\sim} \text{Ber}(\theta)$ per $i = 1, \ldots, n$ delle variabili aleatorie iid. Lo stimatore di massima verosimiglianza è quindi pari a

$$\hat{\theta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} Y_i = \frac{(\text{“numero di successi”})}{n}$$

- Inoltre, si può dimostrare che $i_1(\theta) = \{\theta(1-\theta)\}^{-1}$, da cui si ottiene che

$$Z_n = \sqrt{n} \frac{\hat{\theta} - \theta}{\sqrt{\theta(1-\theta)}} \xrightarrow{d} N(0,1), \qquad n \to \infty.$$

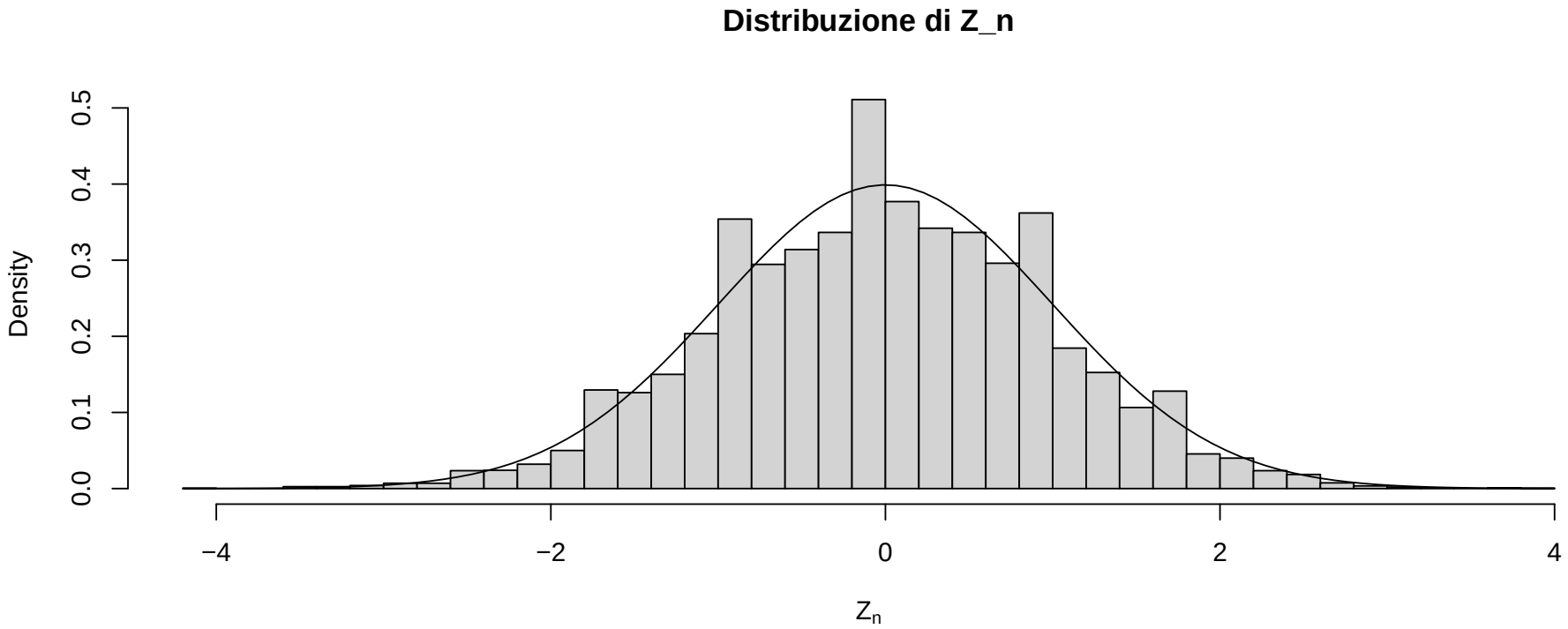
- Vogliamo verificare tramite simulazione questa proprietà in **R**, con $n = 500$ e $\theta = 0.5$.

Approssimazioni asintotiche: esempio

```r
n <- 500; theta <- 0.5; R <- 10^4

Z_n_sample <- function(n, theta) {
  theta_hat <- rbinom(1, n, prob = theta) / n
  # Comando equivalente: come mai?
  # theta_n <- sum(rbinom(n, 1, prob = theta)) / n.

  # Calcolo un singolo valore di Z_n
  sqrt(n) * (theta_hat - theta) / sqrt(theta * (1 - theta))
}

# Effettuo la simulazione
set.seed(100)
Z_n <- replicate(R, Z_n_sample(n, theta))
```

- Per verificare se la variabile casuale Z_n è approssimativamente normale, abbiamo a disposizione almeno due **strategie grafiche**.
- La prima consiste nel confrontare l'istogramma dei campioni ottenuti con la densità gaussiana.

Approssimazioni asintotiche: esempio




```r
# Confronto istogramma / densità teorica
hist(Z_n,
  freq = FALSE,
  main = "Distribuzione di Z_n", xlab = expression(Z[n]),
  breaks = 50
)
curve(dnorm(x, mean = 0, sd = 1), add = TRUE)
```

Il QQ-plot

- Un modo differente per verificare empiricamente se la distribuzione di una variabile X è "simile" a quella di una gaussiana, è tramite il cosiddetto **QQ-plot**.
- In pratica, si confrontano in un diagramma a dispersione i **quantili empirici** con i **quantili teorici**, ovvero

$$\mathcal{Q}_p = (\text{Quantili empirici}), \quad \text{vs} \quad z_p = (\text{Quantili teorici della normale standard}).$$

  su una griglia di valori p di lunghezza n.

- Se il campione osservato ha un comportamento simile a quello della gaussiana, i quantili empirici dovrebbero essere **allineati lungo una retta** con quelli teorici.

Il QQ-plot

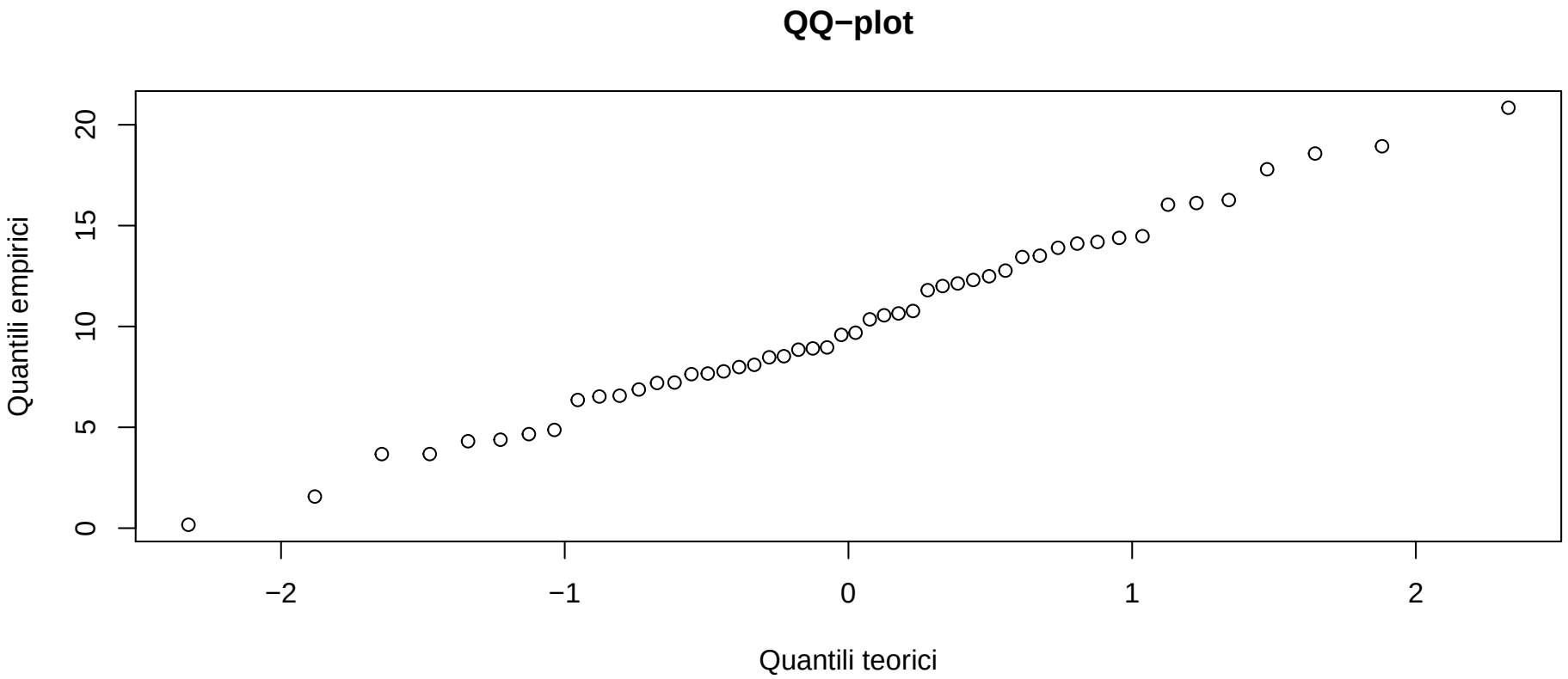
- Innanzitutto, generiamo dei dati fittizi e la la griglia di valori p.

```
set.seed(123)
n <- 50
x <- rnorm(n, mean = 10, sd = 5)

p <- ppoints(n) # Comando che genera una griglia di valori p
p
#  [1] 0.01 0.03 0.05 0.07 0.09 0.11 0.13 0.15 0.17 0.19 0.21 0.23 0.25 0.27 0.29 0.31 0.33
# [18] 0.35 0.37 0.39 0.41 0.43 0.45 0.47 0.49 0.51 0.53 0.55 0.57 0.59 0.61 0.63 0.65 0.67
# [35] 0.69 0.71 0.73 0.75 0.77 0.79 0.81 0.83 0.85 0.87 0.89 0.91 0.93 0.95 0.97 0.99
```

- Calcoliamo quindi i quantili teorici e quelli empirici come segue:

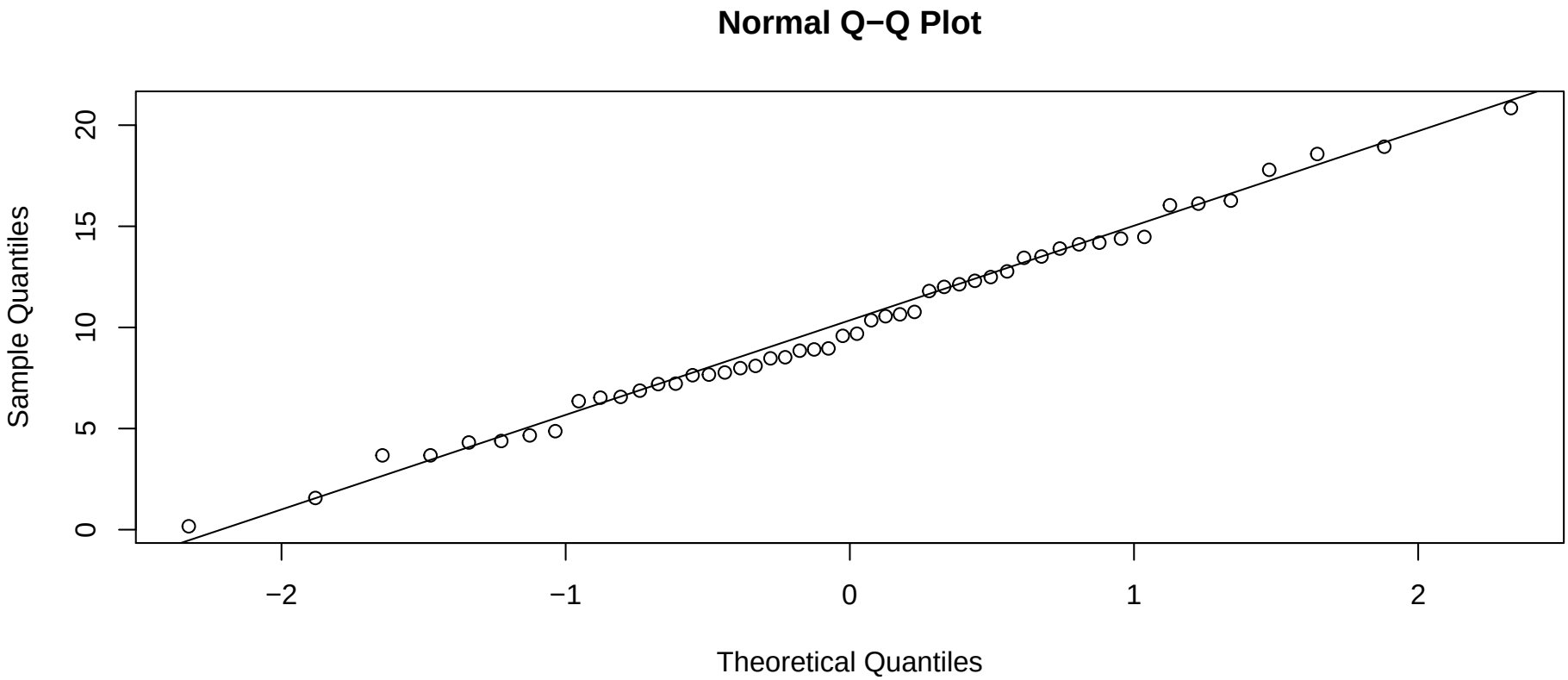
```
z_p <- qnorm(p) # Quantili teorici della normale standard
Q_p <- quantile(x, probs = p, type = 5) # Quantili empirici dei dati
```

Il QQ-plot




```
plot(z_p, Q_p, main = "QQ-plot", xlab = "Quantili teorici", ylab = "Quantili empirici")
```

Il QQ-plot




```r
qqnorm(x) # Grafico ottenuto in precedenza
qqline(x, qtype = 5) # Aggiunta della retta "teorica"
```