《Python统计计算》

（秋季学期）

翟祥
北京林业大学

统计计算

第13章 自助法（Bootstrap）

统计计算

- Bootstrap是一个很通用的工具，用来估计标准误差、置信区间和偏差。由Bradley Efron于1979年提出，用于计算任意估计的标准误差

- 术语“Bootstrap”来自短语“to pull oneself up by one’s bootstraps”（源自西方神话故事“The Adventures of Baron Munchausen”，男爵掉到了深湖底，没有工具，所以他想到了拎着鞋带将自己提起来）
  - 计算机的引导程序boot也来源于此
  - 意义：不靠外界力量，而靠自身提升自己的性能，翻译为自助/自举

- 1980年代很流行，因为计算科学被引入统计实践中来

统计计算

在统计建模中，伴随着参数的估计值，应该同时给出估计的“标准误差”。设总体 $X \sim F(x,\theta), \theta \in \Theta$，$\hat{\phi}$ 是总体的一个参数 ϕ 的估计量，称 $\mathrm{SE} = \sqrt{\mathrm{Var}(\hat{\phi})}$ 为 $\hat{\phi}$ 的**标准误差**。实际工作中 SE 一般是未知的，SE 的估计也称为 $\hat{\phi}$ 的标准误差。对有偏估计，除了标准误差外我们还希望能够估计偏差。进一步地，我们还可能希望得到统计量 $\hat{\phi}$ 的分布，称为抽样分布。

例 3.6.1. 设 $X_i, i = 1,\ldots,n$ 是总体 $X \sim F(x)$ 的样本，样本平均值 $\hat{\phi} = \bar{X} = \frac{1}{n}\sum_i X_i$ 为 $\phi = EX$ 的点估计，$\mathrm{SE}(\bar{X}) = \sqrt{\mathrm{Var}(X)/n}$，可以用 $S/\sqrt{n}$ 估计 $\mathrm{SE}(S^2$ 为样本方差)。根据中心极限定理和强大数律，当样本量 n 较大时可以取 EX 的近似 95% 置信区间为 $\bar{X} \pm 2\,\mathrm{SE}(\bar{X})$。 □

$$\left(\bar{x} - Z_{\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{n}}, \bar{x} + Z_{\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) \qquad \left(\bar{x} - t_{\alpha/2}\frac{s_{n-1}}{\sqrt{n}}, \bar{x} + t_{\alpha/2}\frac{s_{n-1}}{\sqrt{n}}\right)$$

统计计算

- $T_n = g(X_1, ..., X_n)$是一个统计量，或者是数据的某个函数，数据来自某个未知的分布F，我们想知道 T_n 的某些性质（如偏差、方差和置信区间）
- 假设我们想知道T_n的方差 $\mathbb{V}_F(T_n)$
  - 如果$\mathbb{V}_F(T_n)$ 的形式比较简单，可以直接用学习的嵌入式估计量 $\mathbb{V}_{\hat{F}_n}(T_n)$ 作为 $\mathbb{V}_F(T_n)$的估计
  - 例：$T_n = n^{-1}\sum_{i=1} X_i$，则
  - $\mathbb{V}_F(T_n) = \sigma^2/n$，其中 $\sigma^2 = \int_n (x-\mu)^2 dF(x), \mu = \int x dF(x)$
  - $\mathbb{V}_{\hat{F}_n}(T_n) = \hat{\sigma}^2/n$，其中 $\hat{\sigma}^2 = \sum_{i=1}(X_i - \overline{X}_n)^2 \Big/ n$
  - 问题：若 $\mathbb{V}_F(T_n)$ 的形式很复杂（任意统计量），如何计算/估计？

抽样分布

1. 所有样本指标（如均值、比例、方差等）所形成的分布称为抽样分布
2. 是一种理论概率分布
3. 随机变量是 **样本统计量**
   - 样本均值，样本比例等
4. 结果来自容量相同的所有可能样本

样本均值的抽样分布

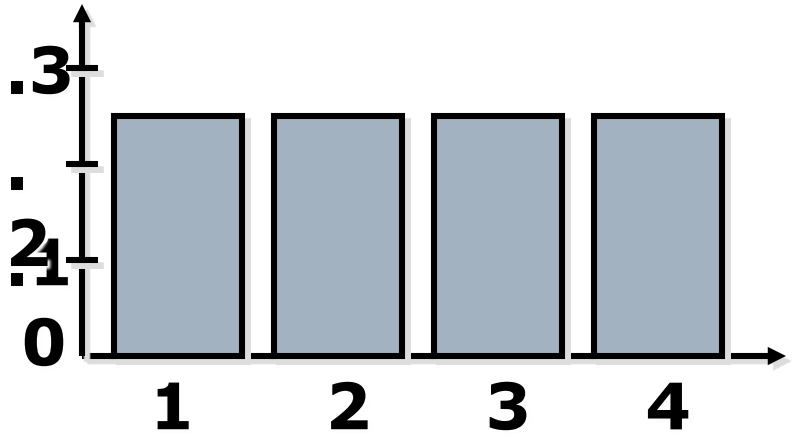
【例】设一个总体，含有4个元素（个体），即总体单位数N=4。4 个个体分别为X_1=1、X_2=2、X_3=3 、X_4=4 。总体的均值、方差及分布如下

均值和方差

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^{N} X_i}{N} = 2.5$$

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{N} (X_i - \mu)^2}{N} = 1.25$$

总体分布



样本均值的抽样分布

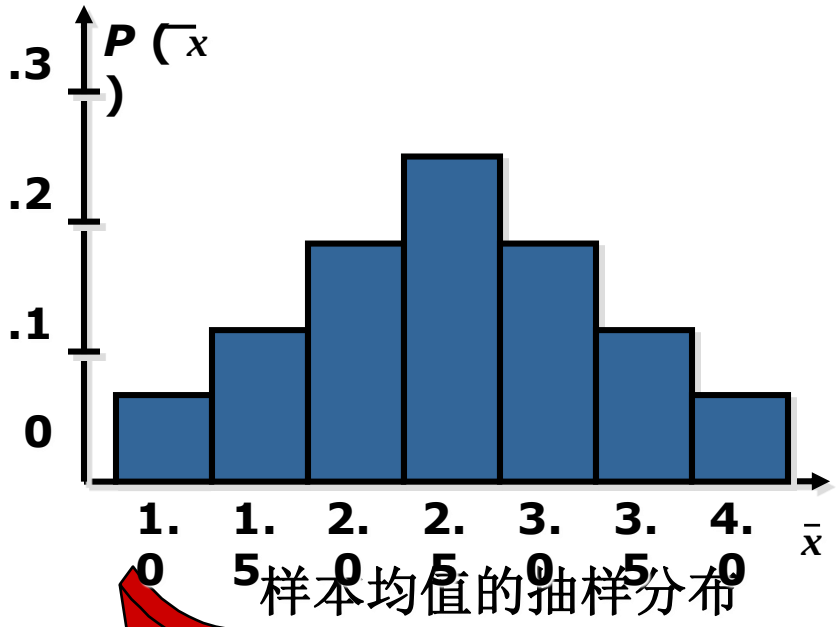
现从总体中抽取$n=2$的简单随机样本，在重复抽样条件下，共有$4^2=16$个样本。所有样本的结果如下表

■所有可能的$n=2$的样本（共16个）				
■第一个观察值	■第二个观察值			
	■1	■2	■3	■4
■1	■1,1	■1,2	■1,3	■1,4
■2	■2,1	■2,2	■2,3	■2,4
■3	■3,1	■3,2	■3,3	■3,4
■4	■4,1	■4,2	■4,3	■4,4

样本均值的抽样分布（一个例子）

➡ 计算出各样本的均值，如下表。并给出样本均值的抽样分布

■16个样本的均值（$\bar{x}$）				
■第一个观察值	■第二个观察值			
	■1	■2	■3	■4
■1	■1.0	■1.5	■2.0	■2.5
■2	■1.5	■2.0	■2.5	■3.0
■3	■2.0	■2.5	■3.0	■3.5
■4	■2.5	■3.0	■3.5	■4.0



样本均值的抽样分布

所有样本均值的均值和方差

$$\mu_{\bar{x}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \bar{x}_i}{M} = \frac{1.0 + 1.5 + \cdots + 4.0}{16} = 2.5 = \mu$$

$$\sigma_{\bar{x}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\bar{x}_i - \mu_{\bar{x}})^2}{M}$$

$$= \frac{(1.0 - 2.5)^2 + \cdots + (4.0 - 2.5)^2}{16} = 0.625 = \frac{\sigma^2}{n}$$

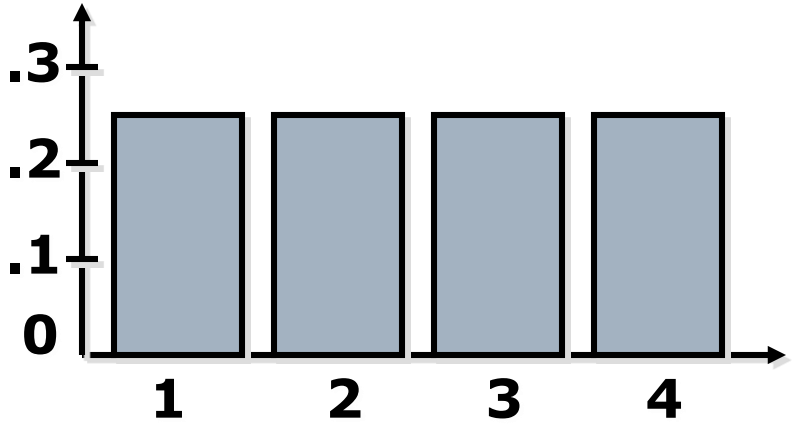
式中：M为样本数目

比较及结论：1. 样本均值的均值（数学期望）等于总体均值

2. 样本均值的方差等于总体方差的1/n

样本均值的分布与总体分布的比较

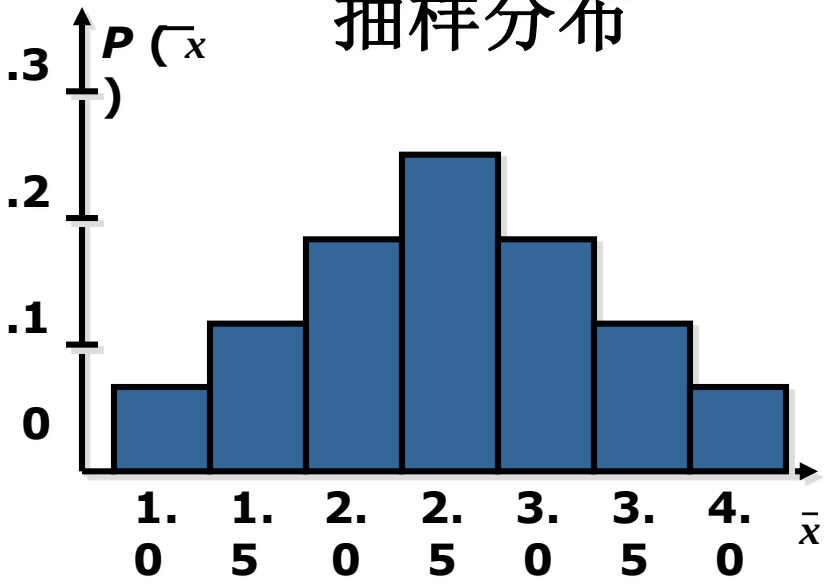
总体分布



$\mu = 2.5$

$\sigma^2 = 1.25$

抽样分布

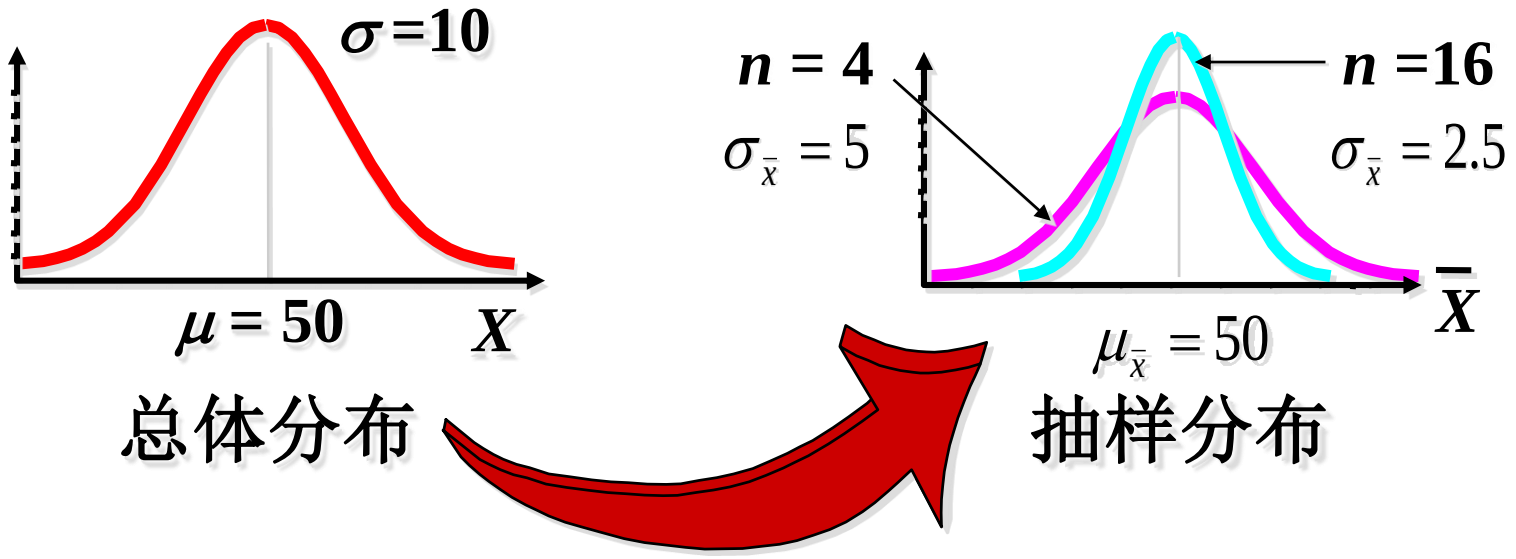


$\mu_{\bar{x}} = 2.5$

$\sigma_{\bar{x}}^2 = 0.625$

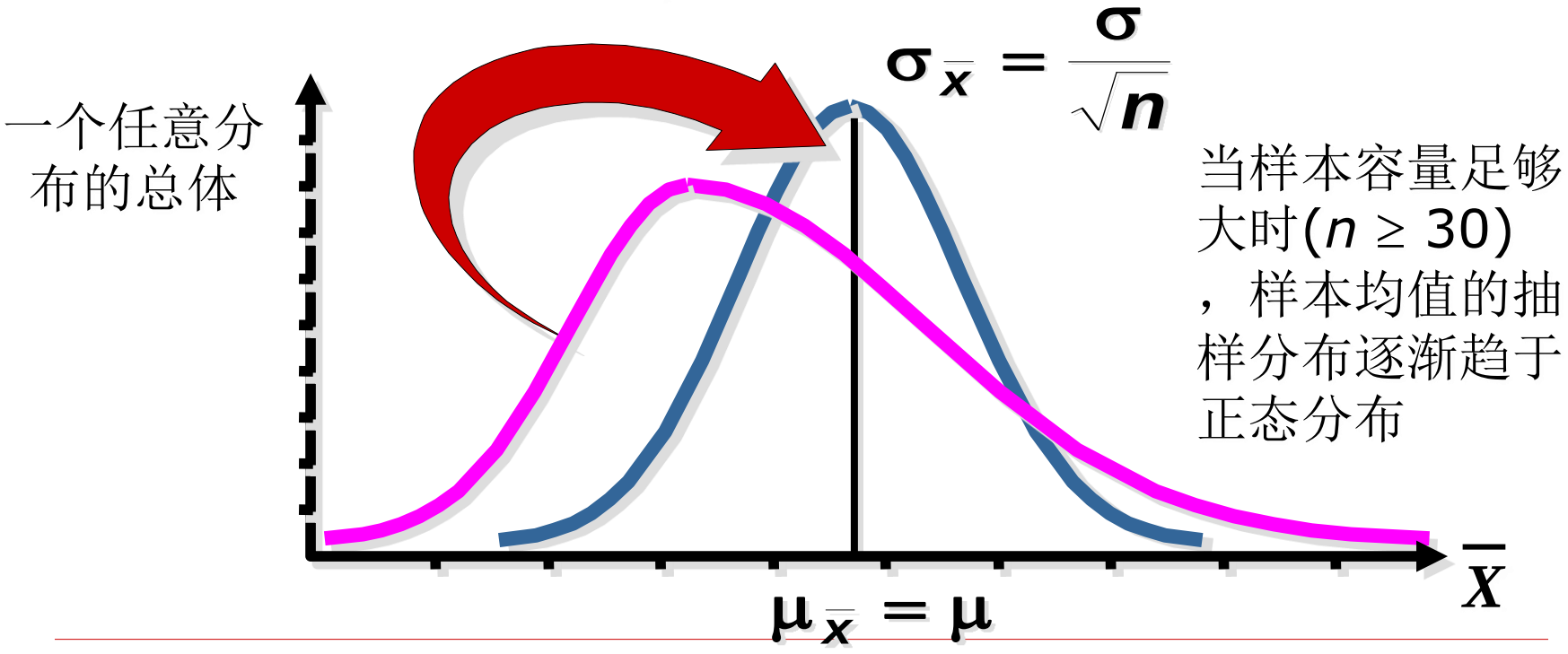
样本均值的抽样分布与中心极限定理

当总体服从正态分布$N \sim (\mu,\sigma^2)$时，来自该总体的所有容量为n的样本的均值 $\bar{X}$也服从正态分布， $\bar{X}$ 的数学期望为μ，方差为σ^2/n。即 $\bar{X} \sim N(\mu,\sigma^2/n)$



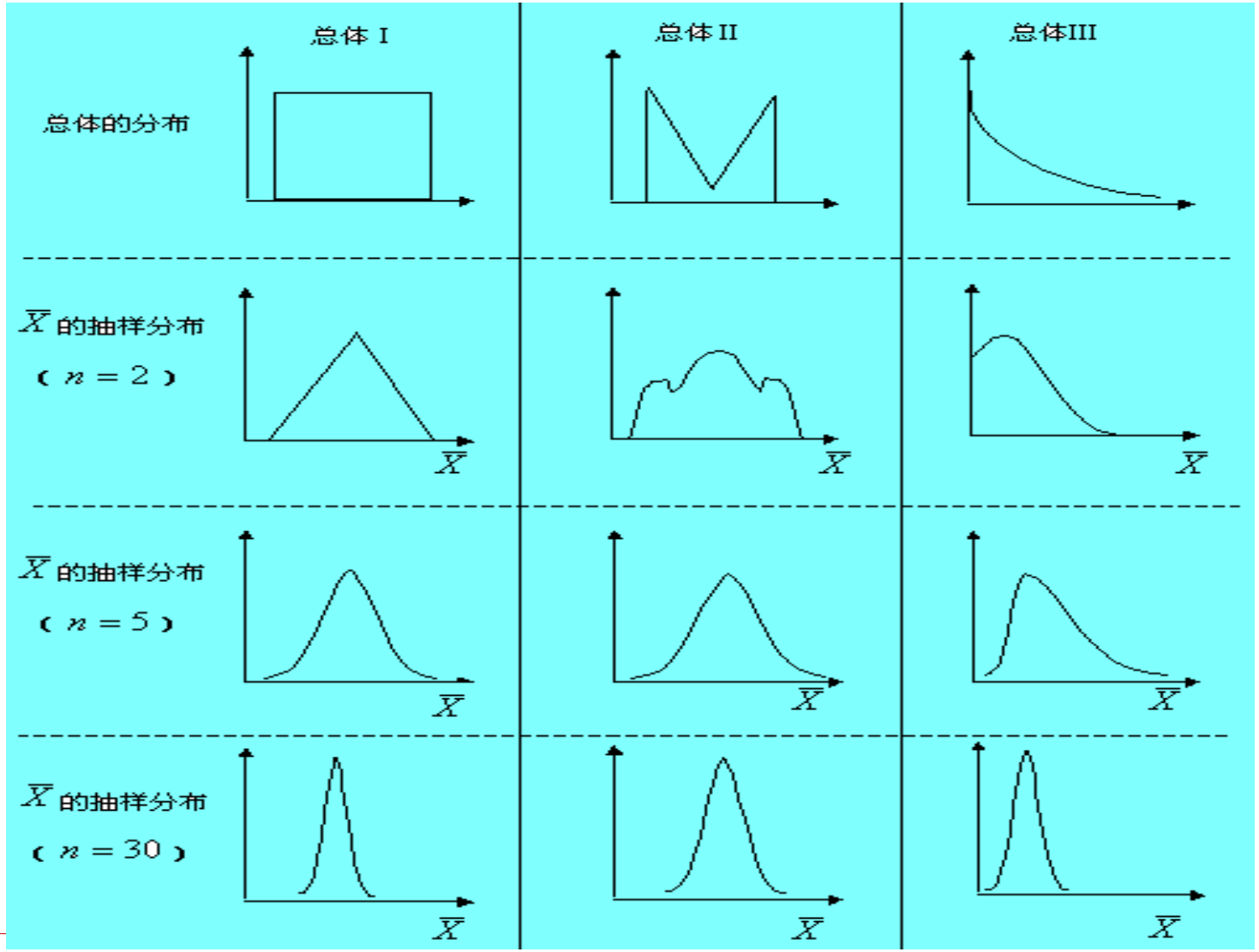
中心极限定理

中心极限定理：设从均值为μ，方差为σ^2的一个任意总体中抽取容量为n的样本，当n充分大时，样本均值的抽样分布近似服从均值为μ、方差为σ^2/n的正态分布



中心极限定理

$\bar{X}$ 的分布趋于正态分布的过程



Bootstrap 方法的引入

- 估计标准误差的困难

1、计算参数估计的标准误差不一定总有简单的公式。

例如，需要估计的参数不一定是*均值* 这样的简单特征，像中位数、相关系数这样的参数估计的标准误差就比*均值*的估计的标准误差要困难得多。

2、在线性模型估计的例子中，如果独立性、线性或者正态分布的假定不满足则求参数估计方差阵变得很困难，比如稳健回归系数的标准误差就很难得到理论公式。

3、在最大似然估计问题中，最大似然估计不一定总是渐近正态的，信息量有时不存在或难以计算，从而无法用上面的方法给出标准误差。

Bootstrap

- Bootstrap：利用计算手段进行重/再采样（Resample）
- 一种基于数据的模拟（simulation）方法，用于统计推断。基本思想是：利用样本数据计算统计量和估计样本分布，而不对模型做任何假设（非参数bootstrap）
- 无需标准误差的理论计算，因此不关心估计的数学形式有多复杂
- Bootstrap有两种形式：非参数bootstrap和参数化的bootstrap，但基本思想都是模拟

Bootstrap

Efron 在1979,1981和1982年的工作中引入和进一步发展了Bootstarp方法, 此后发表了大量的关于 此方法的研究.

Bootstrap方法是一类非参数Monte Carlo方法, 其通过再抽样对总体分布进行估计. 再抽样方法将 观测到的样本视为一个有限总体, 从中进行随机(再)抽样来估计总体的特征以及对抽样总体作出统计推断. 当目标总体分布没有指定时, Bootstrap方法经常被使用, 此时, 样本是唯一已有的信息.

Bootstrap 一词可以指非参数Bootstrap, 也可以指参数Bootstrap(上一讲中). 参数Bootstrap是指总体分布 完全已知, 利用Monte Carlo方法从此总体中抽样进行统计推断; 而非参数Bootstrap是指总体分布完全未知, 利用再抽样

重采样

- 通过从原始数据 $X = X_1, \ldots, X_n$ 进行n次有放回采样n个数据，得到bootstrap样本
  - 对原始数据进行有放回的随机采样，抽取的样本数目同原始样本数目一样（也可以不一样）
- 如：若原始样本为 $X = X_1, X_2, X_3, X_4, X_5$
- 则bootstrap样本可能为

$X_2^* = X_1, X_3, X_1, X_4, X_5$

$X_1^* = X_2, X_3, X_5, X_4, X_5$

Bootstrap

设总体 X 服从某个未知分布 $F(x)$，$\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ 是 X 的一个样本，ϕ 是 F 的一个参数，可以把 ϕ 看成 F 的一个泛函 $\phi(F)$，用统计量 $\hat{\phi}=g(\boldsymbol{X})$ 估计 ϕ，设 $\psi=\psi(g,F,n)$ 是统计量 $\hat{\phi}$ 的某种分布特征 ($\hat{\phi}$ 的抽样分布的数字特征)。例如 $\psi=\sqrt{\mathrm{Var}(\bar{X})}$ 为统计量 $\bar{X}$ 的标准误差，又如取 $\psi=E\hat{\phi}-\phi$ 为统计量 $\hat{\phi}$ 的偏差。可以用随机模拟的方法估计 ψ。

(1) 从样本 $\boldsymbol{X}$ 估计总体分布 F 为 $\hat{F}$;

(2) 从 $\hat{F}$ 抽取 B 个独立样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$, $b=1,\ldots,B$，每一个 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$ 样本量为 n, 称 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$ 为 bootstrap 样本。

(3) 从每个 bootstrap 样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$ 可以估计得到 $\hat{\phi}^{(b)}=g(\boldsymbol{Y}^{(b)})$, $b=1,\ldots,B$。

(4) $\hat{\phi}^{(b)}, b=1,\ldots,B$ 是 $g(\boldsymbol{Y})$ 在 $\hat{F}$ 下的独立同分布样本, 可以用标准的估计方法估计关于 $g(\boldsymbol{Y})$ 在 $\hat{F}$ 下的分布特征 $\hat{\psi}=\psi(g,\hat{F},n)$, 估计结果记作 $\tilde{\psi}$，并以 $\tilde{\psi}$ 作为统计量 $\hat{\phi}$ 的抽样分布的数字特征 $\psi(g,F,n)$ 的估计值。

可以基于参数的bootstrap，也可以基于非参的bootstrap，但基本思想都是模拟

模拟

- 假设我们从T_n的分布G_n中抽取IID样本$T_{n,1},\ldots,T_{n,B}$，当$B \to \infty$时，根据大数定律，

$$\bar{T}_n = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_{n,b} \xrightarrow{P} \int t dG_n \ t = \mathbb{E}\ T_n$$

- 也就是说，如果我们从G_n中抽取大量样本，我们可以用样本均值$\mathbb{E}\ T_n$来近似
  - 当样本数目B足够大时，样本均值$\bar{T}_n$与期望$\mathbb{E}\ T_n$之间的差别可以忽略不计

模拟

- 更一般地，对任意均值有限的函数h，当有

$$\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} h\ T_{n,b} \xrightarrow{P} \int h\ t\ dG_n\ t\ = \mathbb{E}\ h\ T_n$$

- 则当 $h\ T_{n,b}\ =\ T_{n,b} - \bar{T}_n\ ^2$ 时，有

$$\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_{n,b} - \bar{T}_n\ ^2 \xrightarrow{P} \mathbb{E}\ \ T_n - \bar{T}_n\ ^2\ = \mathbb{V}\ T_n$$

  - 用模拟样本的方差来近似方差 $\mathbb{V}\ T_n$

模拟

- 怎样得到T_n的分布？
  - 已知的只有X，但是我们可以讨论X的分布F
  - 如果我们可以从分布F中得到样本 $X_1^*,...,X_n^*$，我们可以计算 $T_n^* = g\ X_1^*,...,X_n^*$
- 怎样得到F？用 $\hat{F}_n$代替（嵌入式估计量）
- 怎样从$\hat{F}_n$中采样？
  - 因为$\hat{F}_n$ 对每个数据点 $X_1,...,X_n$ 的质量都为$1/n$
  - 所以从$\hat{F}_n$ 中抽取一个样本等价于从原始数据随机抽取一个样本
  - 也就是说：为了模拟 $X_1^*,...,X_n^* \sim \hat{F}_n$ 可以通过有放回地随机抽取n个样本（bootstrap 样本）来实现

Bootstrap：一个重采样过程

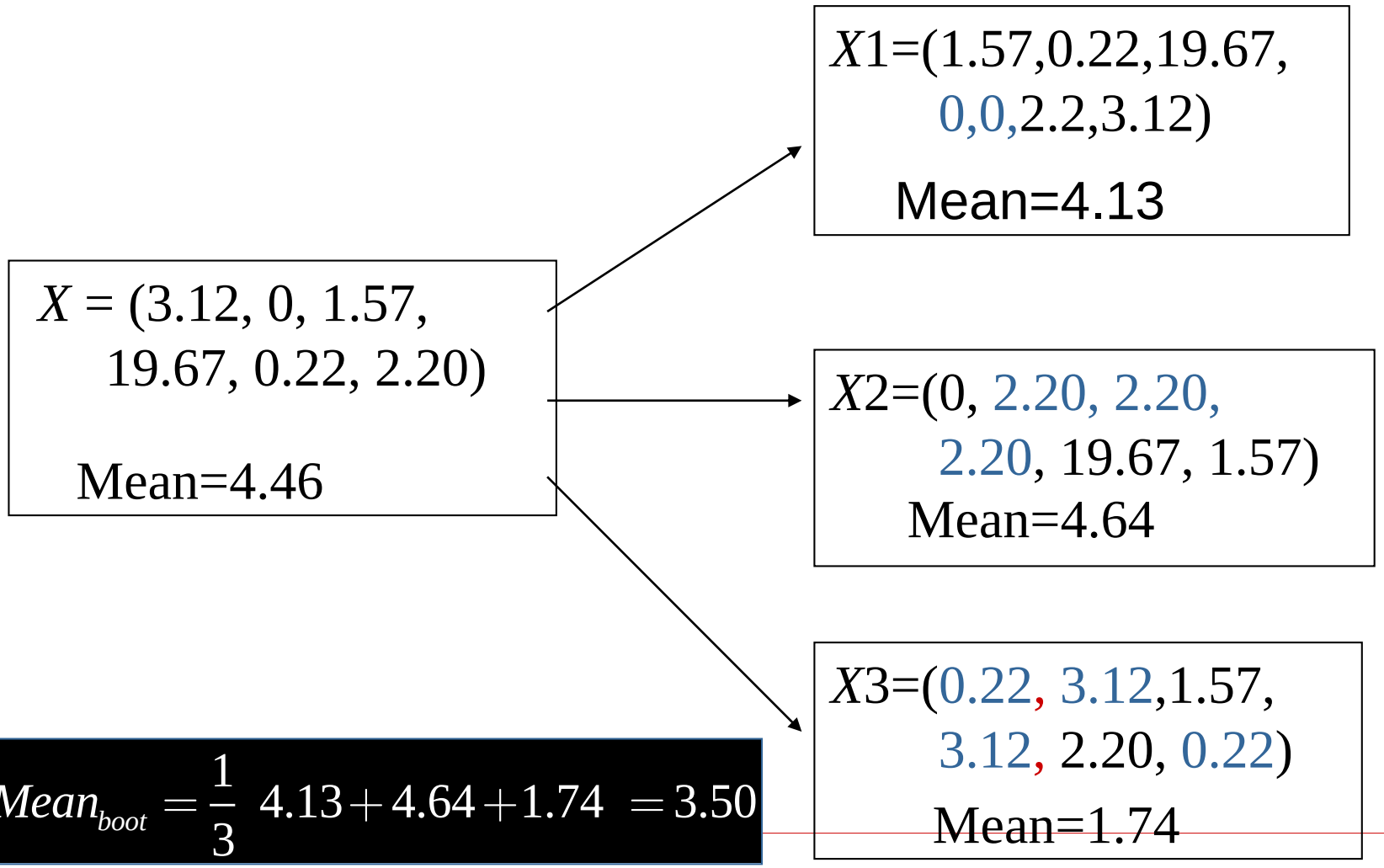
- 重采样：
  - 通过从原始数据 $X = X_1,...,X_n$ 进行有放回采样n个数据，得到bootstrap样本

$$X_b^* = X_{1,b}^*,...,X_{n,b}^*$$

- 模拟：
  - 为了估计我们感兴趣的统计量 $T_n = g(\mathbf{X}) = g(X_1,...,X_n)$ 的方差/中值/均值，我们用 bootstrap样本对应的统计量（bootstrap复制）$T_{n,b}^* = g(X_b^*) = g(X_{1,b}^*,...,X_{n,b}^*)$ 近似，其中 $b = 1,...,B$

$$T_{n\ boot} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_{n,b}^* = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} g(\mathbf{X}_b^*)$$

例：中值


X1=(1.57,0.22,19.67,
0,0,2.2,3.12)
Mean=4.13
X = (3.12, 0, 1.57,
19.67, 0.22, 2.20)
Mean=4.46
X2=(0, 2.20, 2.20,
2.20, 19.67, 1.57)
Mean=4.64
X3=(0.22, 3.12,1.57,
3.12, 2.20, 0.22)
Mean=1.74
$Mean_{boot} = \frac{1}{3}\ 4.13+4.64+1.74\ = 3.50$

Bootstrap方差估计

- 方差： $\mathbb{V}_F\ T_n\ = \sigma_T^2 / n$
- 其中 $\sigma_T^2 = \int\ t - \mu_T\ ^2\ dG_n\ t\ ,$
  - 注意：F为数据X的分布，G为统计量T的分布

$$\mu_T = \int t dG_n\ t$$

- 通过两步实现：
  - 第一步：用 $\mathbb{V}_{\hat{F}_n}\ T_n$ 估计 $\mathbb{V}_F\ T_n$
    - 插入估计，积分符号变成求和
  - 第二步：通过从$\hat{F}_n$ 中采样来近似计算 $\mathbb{V}_{\hat{F}_n}\ T_n$
    - Bootstrap采样+大数定律近似

$$\mathbb{V}_{\hat{F}_n}\ T_n\ = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\ T_{n,b}^* - \bar{T}_n^*\ ^2\ ,\ \bar{T}_n^* = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_{n,b}^*$$

Bootstrap：方差估计

- Bootstrap的步骤：
- 1.画出 $X_1^*,\ldots,X_n^* \sim F_n$ （计算boostrap样本）
- 2.计算$T_n^* = g\ X_1^*,\ldots,X_n^*$ （计算boostrap复制）
- 3.重复步骤1和2共B次，得到$T_{n,1}^*,\ldots,T_{n,B}^*$
- 4. $$v_{boot} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\left(T_{n,b}^* - \frac{1}{B}\sum_{r=1}^{n}T_{n,r}^*\right)^2$$

（大数定律）

Bootstrap：标准误差估计

- 在标准误差估计中，T_n 可为任意统计量
  - 如均值（混合高斯模型的例子）
  - 中值
  - 偏度
  - 极大值
  - …
- 除了用来计算方差外，还可以用作其他应用
  - CDF近似、偏差估计、置信区间估计

相关系数的标准误差估计

例 3.6.5. 设 (H,W) 为某地小学五年级学生的身高和体重的总体，$(H,W)\sim F(\cdot,\cdot)$，考虑 H 和 W 的相关系数 ϕ 的估计。设调查了 $n=10$ 个学生的身高和体重的数据 $(h_i,w_i), i=1,2,\ldots,n$:

h_i	144	166	163	143	152	169	130	159	160	175
w_i	38	44	41	35	38	51	23	51	46	51

计算得 $\hat{\phi}=g(h_1,w_1,\ldots,h_n,w_n)=0.904$。令 $\mathrm{SE}(\hat{\phi})=\left[\mathrm{Var}(\hat{\phi})\right]^{1/2}=\psi(g,F,n)$。设 $\hat{F}$ 为 F 的估计，取为经验分布 F_n，则 bootstrap 方法用随机模拟方法估计 $\psi(g,F_n,n)$，然后当作 $\mathrm{SE}(\hat{\phi})$ 的估计。计算步骤如下：

(1) 从 F_n 中作 $n=10$ 次独立抽样，即从 $\{(h_1,w_1),\ldots,(h_n,w_n)\}$ 中有放回独立抽取 n 次，得到 $\hat{F}=F_n$ 的一组样本 $\boldsymbol{Y}^{(1)}=((h_1^{(1)},w_1^{(1)}),\ldots,(h_n^{(1)},w_n^{(1)}))$;

(2) 重复第 (1) 步, 直到获取了 B 组 bootstrap 样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}, b=1,\ldots,B$;

(3) 对每一样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$ 计算样本相关系数 $\hat{\phi}^{(b)}=g(\boldsymbol{Y}^{(b)}), b=1,\ldots,B$;

(4) 把 $\hat{\phi}^{(b)}, b=1,\ldots,B$ 作为 $\hat{F}$ 下 $n=10$ 的样本相关系数的简单随机样本，估计其样本标准差 S，以 S 作为 $\psi(g,\hat{F},n)$ 的估计, 进而用 S 估计 $\hat{\phi}$ 在真实的总体分布 F 下的标准误差 $\mathrm{SE}(\hat{\phi})$。

取 $B=10000$ 的一次 bootstrap 计算得到的标准误差估计为 $S=0.101$。当 $B\to\infty$ 时 $S\to\psi(g,F_n,n)$, 但是要注意，由于抽样误差影响，$\psi(g,F_n,n)$ 和 $\psi(g,F,n)$ 之间的误差无法避免。

CDF近似

- 令 $G_n(t) = \mathbb{P}(T_n \le t)$ 为 T_n 的CDF
- 则 G_n 的bootstrap估计为

$$\hat{G}_n^*(t) = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} I(T_{n,b}^* \le t)$$

偏差估计（校正）

- 设 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ 为总体 $F(\cdot)$ 的样本，总体参数 $\phi = \phi(F)$ 的估计为 $\hat{\phi} = g(\boldsymbol{X})$, $b = E\hat{\phi} - \phi$ 为估计偏差，$\mathrm{Var}(\hat{\phi})$ 为估计方差。
- 估计的均方误差可以分解为

$$E[\hat{\phi} - \phi]^2 = \mathrm{Var}(\hat{\phi}) + b^2. \tag{3.80}$$

- 如果 $\hat{b}$ 是 b 的估计，则参数 ϕ 的一个改善的估计为 $\tilde{\phi} = \hat{\phi} - \hat{b}$，新的估计在减小了偏差的同时一般也减小了均方误差。

- 设 $b = \psi(g, F, n)$, $\hat{F}$ 是总体分布 F 的一个估计, $\hat{F}$ 取为经验分布 F_n。
- 可以用 $\hat{b} = \psi(g, \hat{F}, n) = Eg(\boldsymbol{Y}) - \hat{\phi}$ 来估计偏差, 其中 $\boldsymbol{Y}$ 是总体 F_n 的样本量为 n 的样本, $\hat{\phi}$ 恰好是总体分布为 F_n 时的参数 ϕ, 即 $\hat{\phi} = \phi(F_n)$。

偏差估计（校正）

- 如果 $\hat{b}$ 不能通过理论公式计算，可以用 bootstrap 方法估计 $\hat{b}$，步骤如下:

(1) 从 $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ 独立有放回地抽取 n 个，记为 $\boldsymbol{Y}^{(1)} = (Y_1^{(1)}, Y_2^{(1)}, \ldots, Y_n^{(1)})$。

(2) 重复第 (1) 步，直到获取了 B 组 bootstrap 样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}, b = 1, 2, \ldots, B$;

(3) 从每个 bootstrap 样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}$ 可以估计得到 $\hat{\phi}^{(b)} = g(\boldsymbol{Y}^{(b)})$, $b = 1, \ldots, B$。

(4) 用 $\hat{\phi}^{(b)}, b = 1, \ldots, B$ 作为 $g(\boldsymbol{Y})$ 在 F_n 下的独立同分布样本，估计 $\hat{b} = \psi(g, F_n, n)$ 为 $\tilde{b} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \hat{\phi}^{(b)} - \hat{\phi}$。

最后，取 $\tilde{\phi} = \hat{\phi} - \tilde{b} = 2\hat{\phi} - \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} \hat{\phi}^{(b)}$ 为改善的估计。

偏差估计

- 偏差的bootstrap估计定义为：

$$Bias_{boot}\left(T_n\right) = \mathbb{E}_F\left(T_n^*\right) - T_n$$

- Bootstrap偏差估计的步骤为：
  - 得到B个独立bootstrap样本 $X_1^*, \ldots, X_B^*$
  - 计算每个bootstrap样本 X_b^* 对应的统计量的值

$$T_{n,b}^* = g\left(X_b^*\right) = g\left(X_{1,b}^*, \ldots, X_{n,b}^*\right)$$

  - 计算bootstrap期望： $\bar{T}_n^* = \frac{1}{B}\sum_{r=1}^{n} T_{n,r}^*$
  - 计算bootstrap偏差： $Bias_{boot}\left(T_n\right) = \bar{T}_n^* - T_n$

例：混合高斯模型：

- 标准误差估计
  - 在标准误差估计中，B为50到200之间结果比较稳定

B	10	20	50	100	500	1000	10000
se_{boot}	0.1386	0.2188	0.2245	0.2142	0.2248	0.2212	0.2187

- 偏差估计 $\bar{X}_n = 4.997$

B	10	20	50	100	500	1000	10000
$\mathbb{E}_F\ \overline{X}^*$	5.0587	4.9551	5.0244	4.9883	4.9945	5.0035	4.9996
$Bias_{boot}$	0.0617	-0.0417	0.0274	-0.0087	-0.0025	0.0064	0.0025

偏差校正

- 如果模型更为复杂，比如，总体分布类型未知，$\hat{b}_1$ 这样的简单偏差估计很难得到，这种情况下可以用 bootstrap 方法进行偏差校正。
- 步骤如下：

  (1) 对 $b = 1, 2, \ldots, B$ 重复：从 $x_1, x_2, \ldots, x_n$ 独立有放回地抽取 n 个，组成 bootstrap 样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)} = (y_1^{(b)}, \ldots, y_n^{(b)})$；

  (2) 对每个 bootstrap 样本计算 $\hat{\phi}^{(b)} = \left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^{(b)}\right)^2$；

  (3) 用 $\tilde{\phi} = 2\bar{X}^2 - \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B}\hat{\phi}^{(b)}$ 作为 μ^2 的改善的估计。

Bootstrap置信区间

枢轴量法是构造置信区间的最基本的方法。设 ϕ 是总体 $F(\cdot)$ 的一个参数, 看成 F 的一个泛函 $\phi=\phi(F)$。$\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ 为总体的样本，$g(\boldsymbol{X})$ 为与 ϕ 有关系的一个统计量，经常是 ϕ 的估计量。如果有变换 $W=h(g(\boldsymbol{X}),\phi)$ 使得 W 的分布不依赖于任何未知参数，则设 W 的左右两侧分位数分别为 $w_{\frac{\alpha}{2}}$ 和 $w_{1-\frac{\alpha}{2}}$, 有

$$P(w_{\frac{\alpha}{2}}<h(T,\phi)<w_{1-\frac{\alpha}{2}})=1-\alpha, \tag{3.84}$$

反解上面的不等式可以得到 ϕ 的置信区间。

如果对枢轴量 W 很难求分位数时，可以用 bootstrap 方法获得置信区间。设 $\hat{F}$ 为总体分布 F 的估计，设 $\boldsymbol{Y}=(y_1,\ldots,y_n)$ 为总体 $\hat{F}$ 的样本，$\hat{\phi}=\phi(\hat{F})$ 为与总体 $\hat{F}$ 对应的参数 ϕ 的值，实际是 ϕ 的估计值，则 $V=h(g(\boldsymbol{Y}),\hat{\phi})$ 与 W 的分布相近，可以用 V 的分位数近似 W 的分位数。

例 3.6.8. 设总体 $X\sim F(x,\theta)$, θ 为总体的未知参数，$\phi=EX$, $\boldsymbol{X}=(x_1,x_2,\ldots,x_n)$ 为总体的样本，则 $g(\boldsymbol{X})=\bar{X}$ 是 ϕ 的估计，若 $W=h(g(\boldsymbol{X}),\phi)=\bar{X}-EX$ 的分布与 θ 无关，求 W 的分位数 $w_{\frac{\alpha}{2}}$ 和 $w_{1-\frac{\alpha}{2}}$ 就可以构造 $\phi=EX$ 的置信区间 $(\bar{X}-w_{1-\frac{\alpha}{2}},\ \bar{X}-w_{\frac{\alpha}{2}})$。

若 W 的分位数无法求得，用经验分布 F_n 作为总体分布 F 的估计，这时 $\phi(F_n)=\bar{X}$, 设 $\boldsymbol{Y}=(Y_1,\ldots,Y_n)$ 为 F_n 的样本，$V=h(g(\boldsymbol{Y}),\bar{X})=\bar{Y}-\bar{X}$，这里 $\bar{X}$ 作为已知值，可以用 V 的分位数近似代替 W 的分位数。求 V 的分位数，只要用有放回独立抽样方法从 $x_1,x_2,\ldots,x_n$ 抽取 F_n 的 B 组样本 $\boldsymbol{Y}^{(b)}=(y_1^{(b)},\ldots,y_n^{(b)}), b=1,2,\ldots,B$, 对每组样本计算平均值 $\bar{Y}^{(b)}$, 定义 $V^{(b)}=\bar{Y}^{(b)}-\bar{X}$, 用 $V^{(b)}, b=1,2,\ldots,B$ 的样本分位数估计 V 的分位数，作为 W 的分位数 $w_{\frac{\alpha}{2}}$ 和 $w_{1-\frac{\alpha}{2}}$ 的近似。 □

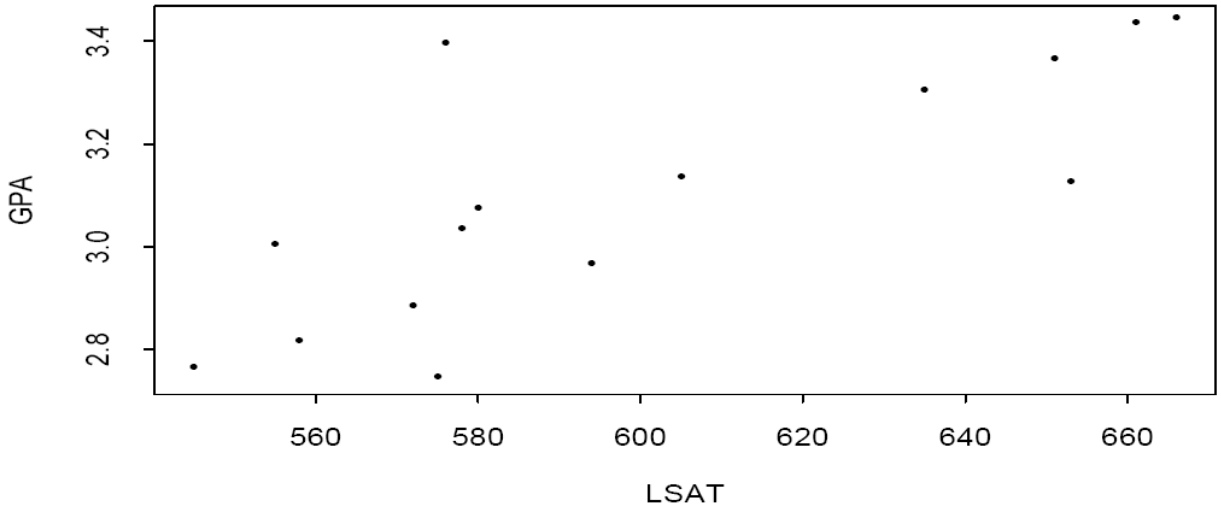
Bootstrap置信区间

- 正态区间：$T_n \pm z_{\alpha/2} se$
  - 简单，但该估计不是很准确，除非 T_n接近正态分布
- 百分位区间：$C_n = T^*_{\alpha/2}, T^*_{1-\alpha/2}$ ，对应 $T^*_{n,1},\ldots,T^*_{n,B}$ 的样本分位数
- 还有其他一些计算置信区间的方法
  - 如枢轴置信区间：$C_n = 2\hat{T} - T^*_{1-\alpha/2}, 2\hat{T} - T^*_{\alpha/2},$

例：Bootstrap置信区间

- 例：Bootstrap方法的发明者Bradley Efron给出了下列用语解释Bootstrap方法的例子。这些数据是LAST分数（法学院的入学分数）和GPA。计算相关系数及其标准误差。

LSAT (*Y*)	576	635	558	578	666	580	555	661
	651	605	653	575	545	572	594	
GPA (*Z*)	3.39	3.30	2.81	3.03	3.44	3.07	3.00	3.43
	3.36	3.13	3.12	2.74	2.76	2.88	2.96	



例8.6 （续）

- 相关系数的定义为：

$$\theta = \frac{\iint (y-\mu_Y)(z-\mu_z)\,dF(y,z)}{\sqrt{\int (y-\mu_Y)^2\,dF(y)\int (z-\mu_z)^2\,dF(z)}}$$

- 相关系数的嵌入式估计量为：

$$\hat{\theta} = \frac{\sum_i (Y_i-\bar{Y})(Z_i-\bar{Z})}{\sqrt{\sum_i (Y_i-\bar{Y})^2 \sum_i (Z_i-\bar{Z})^2}} = 0.776$$

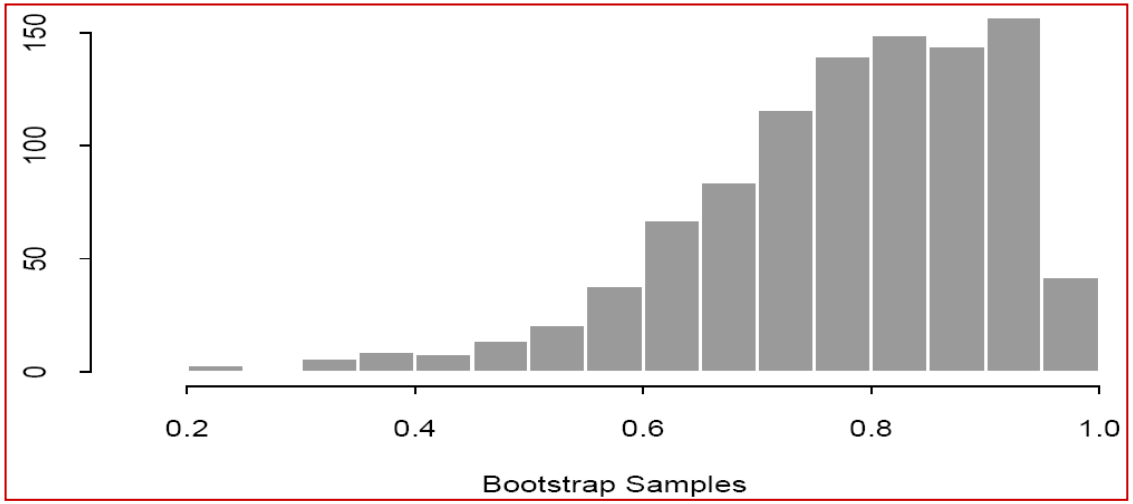
- Bootstrap得到的相关系数插入估计的标准误差为：

B	25	50	100	200	400	800	1600	3200
se_{boot}	0.140	0.142	0.151	0.143	0.141	0.137	0.133	0.132

标准误差趋向稳定于 $se_{boot} \approx 0.132$

例8.6 （续）

- 当B=1000时，$se_{boot} \approx 0.137$
- $\hat{\theta}_1^*, \ldots, \hat{\theta}_B^*$ 的直方图为下图，可近似为从$\hat{\theta}$的分布采样



- 95%的正态区间为：$0.78 \pm 2se = \ 0.51,\ 1.00$
- 95%的百分点区间为：$0.46,\ 0.96$
- 当大样本情况下，这两个区间趋近于相同

非参数bootstrap过程总结

- 对原始样本数据 $X = X_1,...,X_n$ 进行重采样，得到B个bootstrap样本 $X_b^* = X_1^*,...,X_n^*$，其中b=1, …, B
- 对每个bootstrap样本 $X_b^*, b = 1,...,B$，计算其对应的统计量的值（bootstrap复制）

$$T_{n,b}^* = g\ X_b^* = g\ X_{1,b}^*,...,X_{n,b}^*$$

- 根据bootstrap复制 $T_{n,b}^*, b = 1,...,B$，计算其方差、偏差和置信区间等
- 称为非参数bootstrap方法，因为没有对F的先验（即F的知识仅从样本数据中获得）

非参数bootstrap

- 统计量/统计函数：$T = T(F)$
  - 没有对F的先验，F的知识仅从样本数据中获得（CDF估计），统计函数的估计变为嵌入式估计

$$T = T(F), \quad T_n = T(\hat{F}_n) = g(X_1, \ldots, X_n)$$

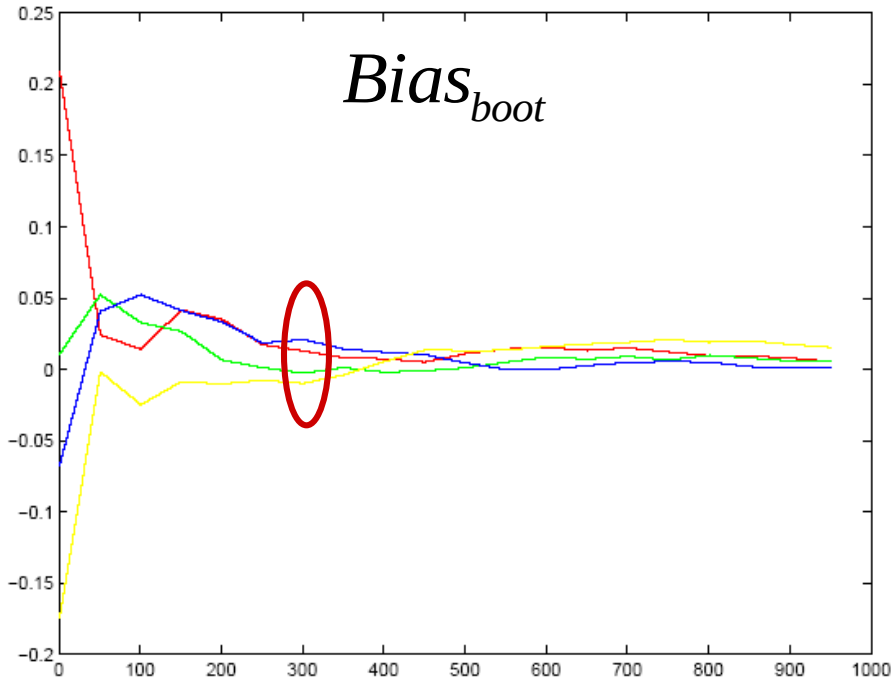
  - 真实世界：$F_n \Rightarrow X_1, \ldots, X_n \Rightarrow T_n = g(X_1, \ldots, X_n)$
  - Bootstrap世界：$F_n \Rightarrow X_1^*, \ldots, X_n^* \Rightarrow T_n^* = g(X_1^*, \ldots, X_n^*)$
  - 如方差计算中，发生了两个近似

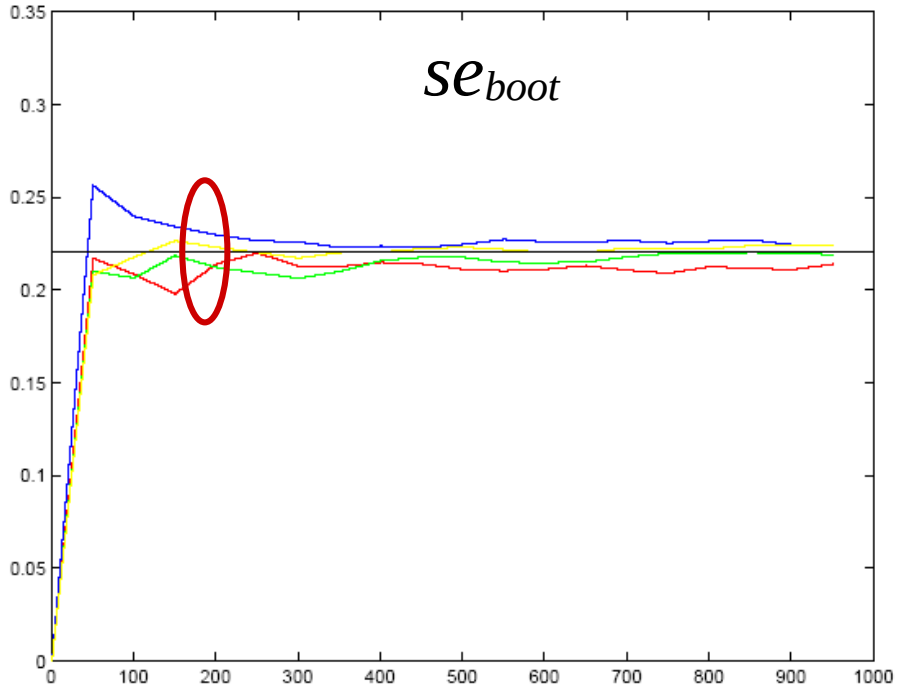
$$\mathbb{V}_F(T_n) = \underset{O(1/\sqrt{n})}{\approx} \mathbb{V}_{F_n}(T_n) = \underset{O(1/\sqrt{B})}{\approx} v_{boot}$$

  - 近似的程度与样本数目n及bootstrap样本的数目B有关

Bootstrap的收敛性

- 例：混合高斯模型：$T_n = \bar{X}_n$
  - $F: F(x) = 0.2N(1,2) + 0.8N(6,1)$
  - n=100个观测样本：$\mathbf{X} = X_1, \ldots, X_{100}$
  - 4次试验得到不同B的偏差和方差的结果





Bootstrap的收敛性

- B的选择取决于
  - 计算机的可用性

$$T_{n\ boot} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_{n,b}^{*}$$

  - 问题的类型：标准误差/偏差/置信区间/…
  - 问题的复杂程度

Bootstrap样本

- 在一次bootstrap采样中，某些原始样本可能没被采到，另外一些样本可能被采样多次
- 在一个bootstrap样本集中不包含某个原始样本 X_i 的概率为

$$\mathbb{P}\ X_j \neq X_i, j=1,...n\ = \left(1-\frac{1}{n}\right)^n \approx e^{-1} \approx 0.368$$

  - 一个bootstrap样本集包含了大约原始样本集的1-0.368 = **0.632**，另外0.368的样本可能永远不会被抽到。
  - 这个在集成学习中成为out-of-bag（oob）。

Bootstrap（参数/非参数）不适合的场合

- 小样本（*n*太小）
  - 原始样本不能很好地代表总体分布
  - Bootstrap只能覆盖原始样本的一部分，带来更大的偏差
- 结构间有关联
  - 如时间/空间序列信号
  - 因为bootstrap假设个样本间独立
- 脏数据
  - 奇异点(outliers)给估计带来了变化

jackknife

- Bootstrap方法并不总是最佳的。其中一个主要原因是bootstrap样本是从$\hat{F}_n$产生而不是从F产生。

- 问题：能完全从F采样或重采样吗？
  - 如果样本数目为n，答案是否定的！
  - 若样本数目为m ($m < n$)，则可以从F中找到数目为m的采样/重采样，通过从原始样本X得到不同的子集就可以！

- 寻找原始样本的不同子集相当于从观测 $X_1, \ldots, X_n$ 进行无放回采样，得到数目为m的重采样样本（在此称为子样本）这就是jackknife的基本思想。

Jackknife样本

- Jackknife样本定义为：一次从原始样本中留出一个样本 $X_i,\ i=1,...,n$ ： $X = X_1,...,X_n$

$$X = X_1,...,X_{i-1},\boxed{X_i},X_{i+1},...,X_n$$

$$X_{(-i)} = X_1,...,X_{i-1},\quad X_{i+1},...,X_n$$

  - Jackknife样本中的样本数目为$m=n-1$
  - 共有n个不同的jackknife样本
  - 无需通过采样手段得到 jackknife样本

python™

谢谢Q/A