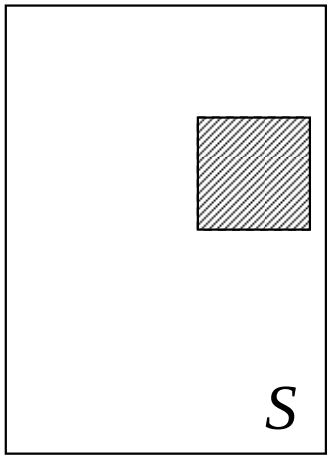
Jackknife, Bootstrap e outros métodos de reamostragem

Camilo Daleles Rennó
camilo@dpi.inpe.br

Referata Biodiversa (http://www.dpi.inpe.br/referata/index.html)
São José dos Campos, 8 de dezembro de 2011

Inferência Estatística

inferir certas características
da população



distribuição desconhecida
e/ou
parâmetros desconhecidos

amostra

n indivíduos (ou objetos) da população
ex: sortear n *pixels* de uma imagem
(com ou sem reposição)

n realizações da v.a.
ex: medir a reflectância de um objeto
n vezes

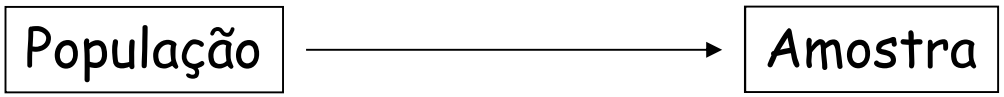
⇓

a amostra constitui um conjunto de n v.a.
$X_1, X_2, \ldots, X_n$ com mesma distribuição (desconhecida)

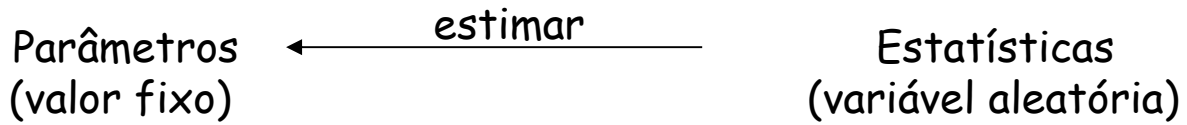
⇓

Amostra Aleatória

Estimação de Parâmetros



Distribuição de Probabilidade (ou FDP) Distribuição Amostral (Frequências)



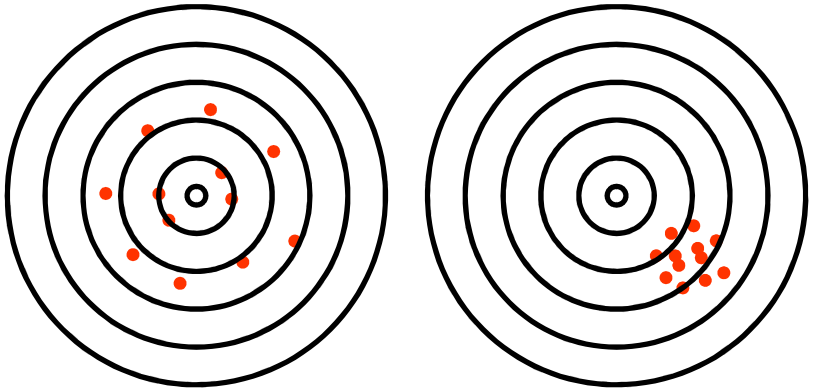
Estimação
- pontual (estatísticas)
- por intervalo (intervalos de confiança)

Como as estatísticas são usadas para estimar o parâmetro, elas também são chamadas estimadores

Estimação Pontual

Característica ideal de um estimador

- não tendencioso $\leftrightarrow$ exatidão/acurácia
- variância mínima $\leftrightarrow$ precisão/incerteza



Exato
Impreciso

Inexato
Preciso

Tiro ao alvo

Avaliação da Incerteza de um Estimador

Exemplo: Seja X uma v.a. com distribuição desconhecida, com a média (μ) e a variância (σ^2) também desconhecidas. Retira-se uma amostra de tamanho n com a finalidade de se estimar μ.

$$\hat{\mu} = \bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i}{n} = \underbrace{\sum_{j=1}^{N} x_j FR(X = x_j)}_{\text{dados agrupados}} \qquad Var(\hat{\mu}) = Var(\bar{X}) = \frac{\sigma^2}{n}$$

Como $\bar{X}$ é uma v.a., qual sua distribuição?

$$\bar{X} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma^2}{n}\right)$$

se X tiver distribuição normal
ou
n for grande (TLC)

$$\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \sim N(0,1) \quad \text{(Normal Padrão)}$$

$$\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \sim t_{n-1} \quad \text{(t de student)}$$

desvio padrão amostral

Desvantagens da Estatística Clássica

- nem todos os estimadores têm sua distribuição amostral facilmente definida, mesmo quando se conhece a distribuição original da variável aleatória estudada

  exemplo: mediana, coeficientes de regressões não lineares, etc

- quando a amostra é pequena, certas suposições podem não ser válidas, dificultando a obtenção da distribuição amostral de um estimador qualquer.

  exemplo: média amostral pode não ter distribuição normal (amostra pequena = TLC inválido)

Suposições de algumas Estatísticas Clássicas

- ANOVA (comparação entre r médias)
  r populações normalmente distribuídas com variâncias iguais

- regressão

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 X_i + \varepsilon_i \qquad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

$$Y_i = \beta_0 X_i^{\beta_1} \varepsilon_i \qquad \log \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

- proporção

$$Var(\hat{p}) = \frac{p(1-p)}{n} \approx \frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}$$ amostras "grandes"

- índice de concordância Kappa

$$\hat{\kappa} = \frac{\theta_1 - \theta_2}{1-\theta_2} \qquad Var(\hat{\kappa}) = \frac{1}{n}\left[\frac{\theta_1(1-\theta_1)}{(1-\theta_2)^2} + \frac{2(1-\theta_1)(2\theta_1\theta_2 - \theta_3)}{(1-\theta_2)^3} + \frac{(1-\theta_1)^2(\theta_4 - 4\theta_2^2)}{(1-\theta_2)^4}\right]$$

$$\frac{\hat{\kappa} - \kappa}{\sqrt{\mathrm{Var}(\hat{\kappa})}} \sim N(0,1) \qquad \frac{(\hat{\kappa}_1 - \hat{\kappa}_2) - (\kappa_1 - \kappa_2)}{\sqrt{\mathrm{Var}(\hat{\kappa}_1) + \mathrm{Var}(\hat{\kappa}_2)}} \sim N(0,1)$$ amostras "grandes" e independentes

Reamostragem

Testes paramétricos clássicos comparam estatísticas calculadas a partir de uma amostra à distribuições amostrais teóricas.

A reamostragem é o nome que se dá a um conjunto de técnicas ou métodos que se baseiam em calcular estimativas a partir de repetidas amostragens dentro da mesma amostra (única).

Tipos de reamostragem:

- Testes de Aleatorização (Testes de Permutação)
- Validação Cruzada
- Jackknife
- Bootstrap

Testes de Aleatorização

Testes de aleatorização (ou testes de permutação ou testes exatos) são típicos testes de significância onde a distribuição da estatística testada é obtida calculando-se todos os possíveis valores desta estatística rearranjando-se os valores da amostra considerando uma hipótese nula verdadeira.

Pode-se usar a simulação Monte Carlo quando número exato de permutações é muito grande.

Região	Área corretamente classificada		Dif
	1 imagem	2 imagens	
1	70	117	47
2	51	48	-3
3	60	63	3
4	57	90	33
5	43	41	-2
6	15	21	6
7	25	36	11
8	103	122	19

Dif média = 14,25

Qual valor esperado caso não houvesse diferença entre o número de imagens utilizadas?

Quão raro seria encontrar o valor 14,25 nesse caso?

(ver exemplos.xls)

Validação Cruzada

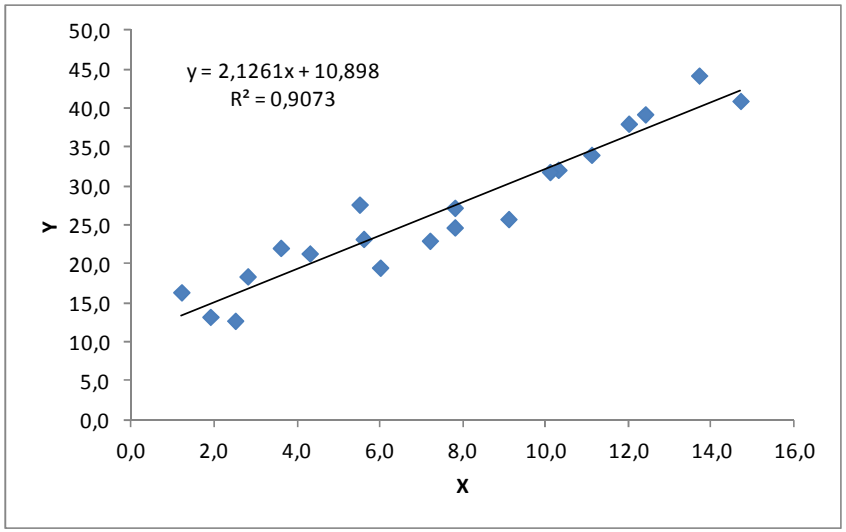
Tipicamente, na validação cruzada, a amostra é dividida aleatoriamente em dois subconjuntos: um de treinamento e outro de teste (validação).

Num estudo de regressão, por exemplo, um conjunto pode ser usado para calcular os coeficientes da equação e o outro para comparar com os valores estimados por esta regressão.

Esta análise pode ficar comprometida quando a amostra é muito pequena.

X	*Y*
1,2	16,4
1,9	13,3
2,8	18,4
4,3	21,4
5,5	27,7
6,0	19,6
7,2	23,0
7,8	27,2
9,1	25,8
10,3	32,1

X	*Y*
11,1	34,0
13,7	44,2
14,7	41,0
2,5	12,8
3,6	22,1
5,6	23,3
7,8	24,7
10,1	31,9
12,0	38,0
12,4	39,2



(ver exemplos.xls)

Jackknife

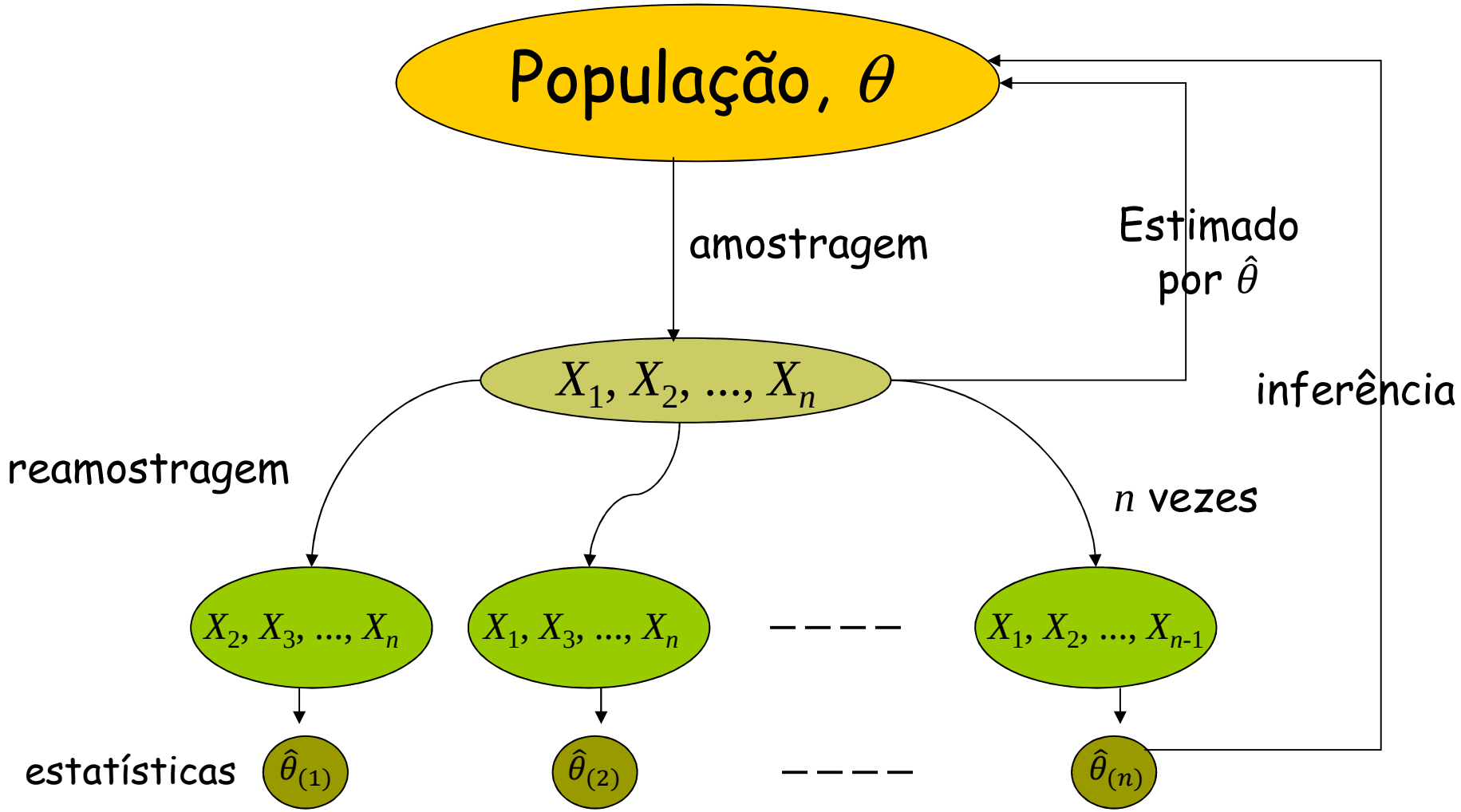
Também chamado "leave-one-out"

Usado para estimar a variância e a tendência de um estimador qualquer.

Baseia-se na remoção de 1 amostra (podendo ser mais) do conjunto total observado, recalculando-se o estimador a partir dos valores restantes.

É de fácil implementação e possui número fixo de iterações (n caso se retire apenas 1 amostra por vez).

Jackknife


População, θ
amostragem
Estimado por $\hat{\theta}$
$X_1, X_2, ..., X_n$
inferência
reamostragem
n vezes
$X_2, X_3, ..., X_n$
$X_1, X_3, ..., X_n$
$X_1, X_2, ..., X_{n-1}$
estatísticas
$\hat{\theta}_{(1)}$
$\hat{\theta}_{(2)}$
$\hat{\theta}_{(n)}$

Variância de Jackknife

Suponha que um determinado parâmetro θ pode ser estimado a partir de uma amostra de n valores, ou seja,

$$\hat{\theta} = f(x_1, x_2, ..., x_n)$$

Então a i-ésima replicação Jackknife corresponde ao valor estimado sem a amostra i:

$$\hat{\theta}_{(i)} = f(x_1, x_2, ...x_{i-1}, x_{i+1}, ..., x_n)$$

Define-se o i-ésimo pseudovalor como:

$$x^*_{(i)} = N\hat{\theta} - (N-1)\hat{\theta}_{(i)}$$

Variância de Jackknife

Com base nos pseudovalores, pode-se calcular então:

$$\hat{\theta}_{jk} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x^{*}_{(i)} = N\hat{\theta} - (N-1)\hat{\theta}_{(.)} \qquad \text{onde} \quad \hat{\theta}_{(.)} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{\theta}_{(i)}$$

$$Var_{jk}\left(\hat{\theta}\right) \cong \frac{n-1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(\hat{\theta}_{(i)} - \hat{\theta}_{(.)}\right)^2$$

	X
1	2,2
2	3,5
3	3,4
4	6,7
5	6,2
6	8,2
7	9,2
8	7,9
9	9,0
10	10,1

Qual a média geométrica?

Qual a incerteza associada a esta estimativa?

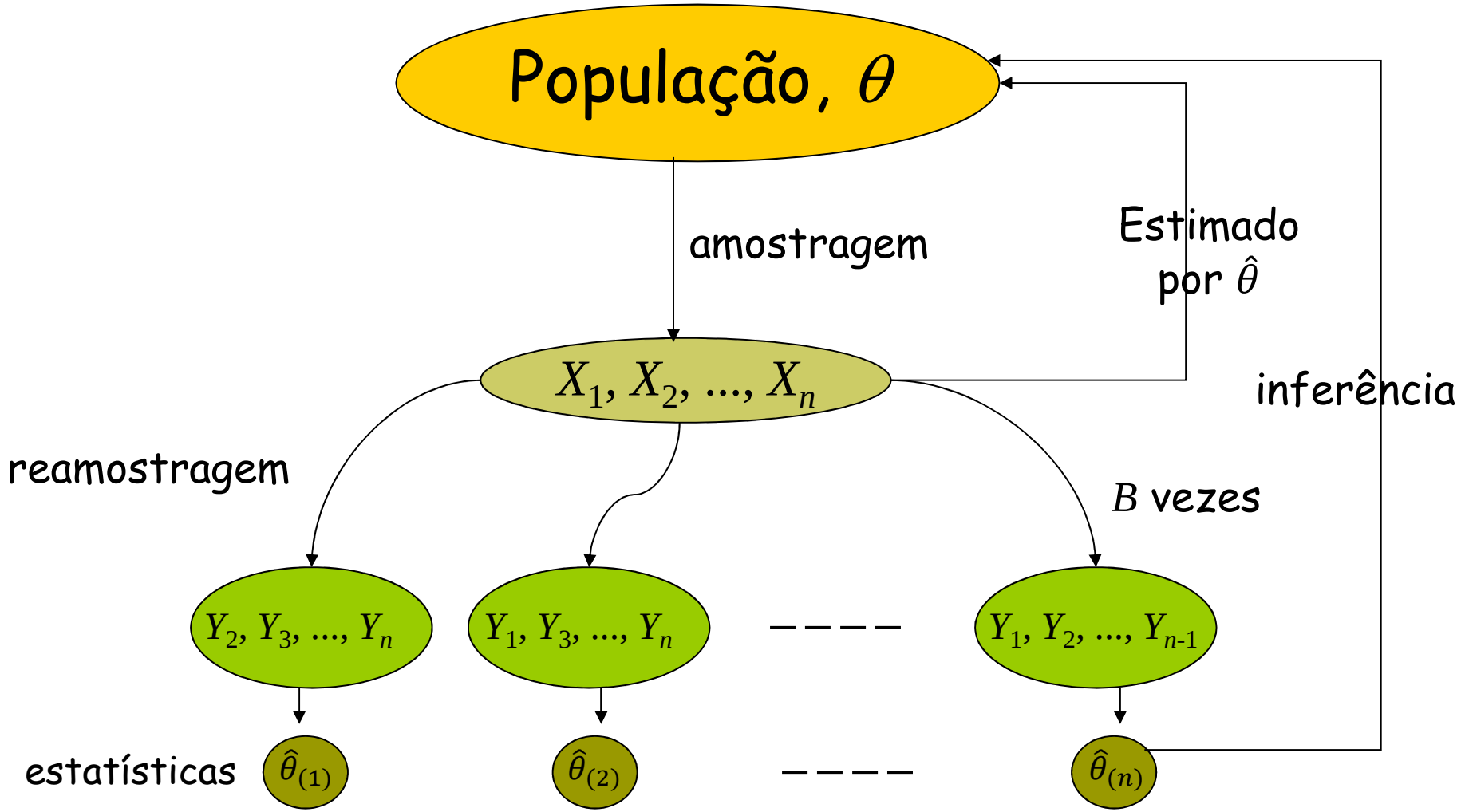
(ver exemplos.xls)

Bootstrap

Pode ser considerado uma estratégia mais abrangente que o Jackknife por permitir uma maior número de replicações. Também é usado para estimar a variância e a tendência de um estimador qualquer.

Baseia-se na geração de uma nova amostra de mesmo tamanho da amostra original, a partir do sorteio aleatório com reposição de seus elementos.

Bootstrap


População, θ
amostragem
Estimado por $\hat{\theta}$
$X_1, X_2, ..., X_n$
inferência
reamostragem
B vezes
$Y_2, Y_3, ..., Y_n$
$Y_1, Y_3, ..., Y_n$
$Y_1, Y_2, ..., Y_{n-1}$
estatísticas
$\hat{\theta}_{(1)}$
$\hat{\theta}_{(2)}$
$\hat{\theta}_{(n)}$

Variância de Bootstrap

Suponha que um determinado parâmetro θ pode ser estimado a partir de uma amostra de n valores, ou seja,

$$\hat{\theta} = f(x_1, x_2, ..., x_n)$$

Então a cada iteração j o valor estimado a partir da amostra será:

$$\hat{\theta}_{(j)} = f(y_1, y_2, ...y_n)$$ onde y_i é um dos valores da amostra (com reposição)

Variância de Bootstrap

Com base nas estimativas, pode-se calcular então:

$$\hat{\theta}_b = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}\theta_{(j)}$$

$$Var_b\left(\hat{\theta}\right) \cong \frac{1}{m-1}\sum_{j=1}^{m}\left(\hat{\theta}_{(j)} - \hat{\theta}_{(.)}\right)^2$$

	X
1	2,2
2	3,5
3	3,4
4	6,7
5	6,2
6	8,2
7	9,2
8	7,9
9	9,0
10	10,1

Qual a média geométrica?

Qual a incerteza associada a esta estimativa?

(ver exemplos.xls)