Бутстреп

Ph@DS, весна 2025

Как оценить математическое ожидание?

Пусть

- P - некоторое распределение (возможно, многомерное)
- $f(x)$ - некоторая функция

Задача: оценить $I = \mathrm{E}_{\mathrm{P}} f(X),\ X \sim \mathrm{P}$

Способы оценки:

- Использовать методы из вычматов для вычисления интегралов (метод прямоугольников и т.п.)
- Вспомнить теорию вероятностей!

Решение проблемы

Монте-Карло!!!

Метод Монте-Карло

- Сгенерируем выборку $Y_1, \ldots, Y_N \sim \mathsf{P}$
- Используем привычную оценку:

$$\widehat{I} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} f(Y_i) = \overline{f(Y)}$$

Свойства:

- Если $I < \infty \Rightarrow \widehat{I} \xrightarrow{\mathsf{P}} I$
- Если $\mathsf{E} f^2(Y_1) < \infty \Rightarrow \sqrt{n} \frac{\widehat{I} - I}{\sqrt{\mathsf{D} f(Y_1)}} \overset{d}{\approx} \mathcal{N}(0, 1)$

Бутстреп

Постановка задачи

$X = (X_1, ..., X_n)$ — выборка

$T(X_1, ..., X_n)$ — статистика

Задача: оценить распределение $T(X)$ или функционал $V(T(X))$.

Пример: оценка дисперсии статистики

$$V(T(X_1, ..., X_n)) = \mathsf{D}T(X_1, ..., X_n) = \mathsf{E}T^2(X) - (\mathsf{E}T(X))^2$$

Монте-Карло? Не знаем никаких распределений...

Генерация из эмпирического распределения

$X = (X_1, ..., X_n)$ — выборка

Для множества B оценим вероятность

попасть в это множество $\mathrm{P}(B)$:

$$\widehat{\mathrm{P}}_n(B) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} I\{X_i \in B\} = \overline{I\{X \in B\}}$$

По УЗБЧ,

$$\widehat{\mathrm{P}}_n(B) \xrightarrow{\text{п.н.}} \mathrm{P}(B)$$

Идея: использовать равномерное дискретное распределение (с учетом повторений) на элементах выборки для генерации.

Метод бутстрепа

Этап 1. Генерация выборки из эмпирического распределения $\widehat{\mathsf{P}}_n$.

Генерация случайной величины из $\widehat{\mathsf{P}}_n$:

выбор случайного элемента из мн-ва $\{X_1, ..., X_n\}$

Генерация выборки $X_1^*, ..., X_n^*$ из $\widehat{\mathsf{P}}_n$:

упоряд. выбор **с возвращением** n элементов из мн-ва $\{X_1, ..., X_n\}$.

Другой вид записи:

1. $i_1, ..., i_n \sim U\{1, ..., n\}$.
2. $X^* = (X_1^*, ..., X_n^*) = (X_{i_1}, ..., X_{i_n})$ — бутстрепная выборка.

Важно: размер выборки равен исходному

Метод бутстрепа

Этап 2.

Процедуру генерации выборок повторить B раз:

$$X_b^* = (X_{b1}^*, ..., X_{bn}^*), \text{ где } 1 \leqslant b \leqslant B.$$

Далее по каждой выборке посчитаем значение статистики T, получив выборку значений: $T_1^* = T(X_1^*), ..., T_B^* = T(X_B^*)$.

Этап 3.

Полученную выборку использовать для аппроксимации значения оценки, которая называется *бутстрепной оценкой*.

Например, бутстрепная оценка дисперсии имеет вид

$$\widehat{v}_{boot} = \frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} {T_b^*}^2 - \left(\frac{1}{B}\sum_{b=1}^{B} T_b^*\right)^2,$$

Схема метода бутстрепа

$X = (X_1, \dots, X_n)$ — выборка

$T(X_1, \dots, X_n)$ — статистика

Задача: оценить распределение $T(X)$ или функционал $V(T(X))$.

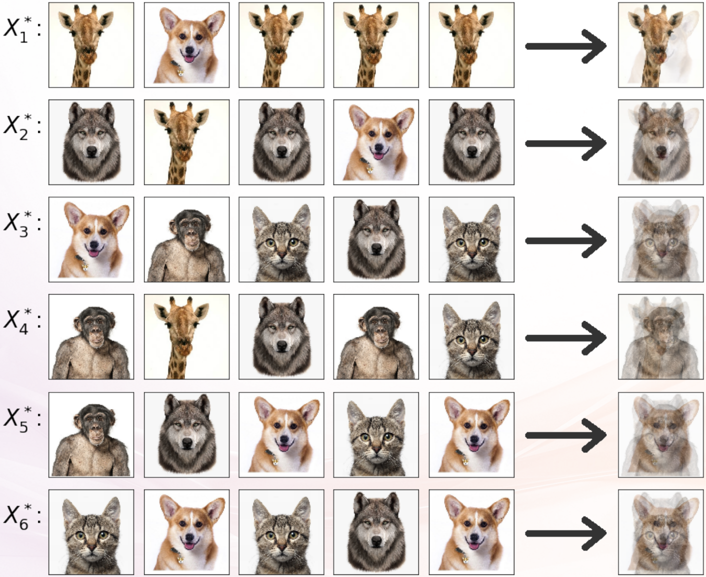
$$
\left.
\begin{array}{ccc}
X^*_{11}, \; \dots, \; X^*_{1n} & \longrightarrow & T(X^*_1) \\
 & & \dots \\
X^*_{b1}, \; \dots, \; X^*_{bn} & \longrightarrow & T(X^*_b) \\
 & & \dots \\
X^*_{B1}, \; \dots, \; X^*_{Bn} & \longrightarrow & T(X^*_B)
\end{array}
\right\} \; v_{boot} \text{ — бутстрепная оценка } v = V(T(X))
$$

Зоопарк: оценить дисперсию выборочного среднего

Выборка:

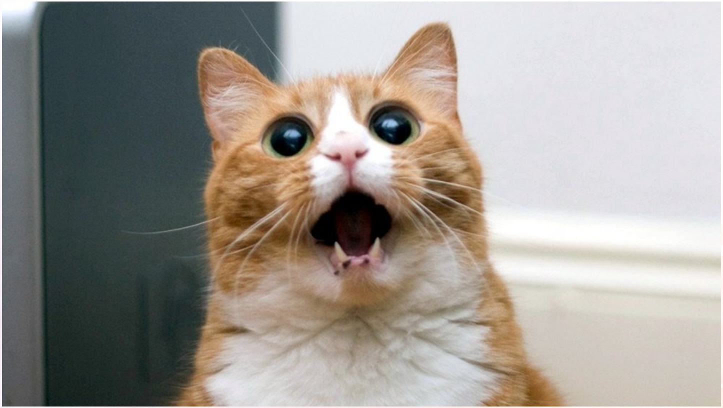
Задача: Для каждого пикселя и каждого цветового канала оценить дисперсию выборочного среднего.

Зоопарк: оценить дисперсию выборочного среднего



Зоопарк: оценить дисперсию выборочного среднего

Дисперсия по бутстрепной выборке средних:



Увидите на семинаре!

Особенности

- Два этапа аппроксимации

$$v \underbrace{\approx}_{\text{эмп. р-ие}} \widehat{v} \underbrace{\approx}_{\text{Монте-Карло}} \widehat{v}_{boot}.$$

  Точность аппроксимации из-за эмп. р-ия: $1/\sqrt{n}$

  Точность аппроксимации м. Монте-Карло: $1/\sqrt{B}$

- Число B стоит брать как можно больше.

- Размер бутстрепной выборки **всегда тот же**, что и у исходной.

  При генерации выборок иного размера распределение статистики T, вообще говоря, может быть другим.

  Например, дисперсия выборочного среднего зависит от размера выборки.

- Генерация бутстр. выборки проводится независимо с повторами.

  Иначе полученный набор даже не является выборкой.

Бутстрепные доверительные интервалы

1. **Нормальный интервал**

   Пусть $\widehat{\theta}$ — а.н.о. θ с ас. дисп. $\sigma^2(\theta)$.

   $\widehat{v}_{boot}$ — бутстрепная оценка дисперсии.

   Бутстрепный дов. интервал для параметра θ имеет вид

$$\left(\widehat{\theta} - z_{(1+\alpha)/2}\sqrt{\widehat{v}_{boot}}, \quad \widehat{\theta} + z_{(1+\alpha)/2}\sqrt{\widehat{v}_{boot}}\right)$$

2. **Центральный интервал**

   $\theta = G(\mathsf{P})$ и $\widehat{\theta} = G(\widehat{\mathsf{P}}_n)$ — оценка методом подстановки.

   $\theta_1^*, ..., \theta_B^*$ — оценки по бутстрепным выборкам.

   Бутстрепный доверительный интервал имеет вид

$$C^* = \left(2\widehat{\theta} - \theta^*_{(\lceil B(1+\alpha)/2\rceil)}, \quad 2\widehat{\theta} - \theta^*_{(\lfloor B(1-\alpha)/2\rfloor)}\right).$$

Бутстрепные доверительные интервалы

3. **Квантильный интервал**

   $\widehat{\theta}$ — некоторая оценка θ.

   $\theta_1^*, ..., \theta_B^*$ — оценки по бутстрепным выборкам.

   Бутстрепный доверительный интервал имеет вид

$$C^* = \left(\theta^*_{(\lfloor B(1-\alpha)/2 \rfloor)}, \quad \theta^*_{(\lceil B(1+\alpha)/2 \rceil)}\right).$$

Утверждение. Если существует монотонное преобразование φ, для которого $\varphi(\widehat{\theta}) \sim \mathcal{N}(\varphi(\theta), \sigma^2)$, то $\mathsf{P}\left(\theta \in C^*\right) = \alpha$.

На практике такое преобразование существует редко, но при этом часто может существовать приближенное преобразование.

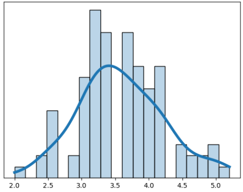
Пример: построение дов. интервалов для θ

$x = (5, 1, 3, 6, 4)$ — реализация выборки

$\theta = \mathsf{E}X_1$ — параметр, $\widehat{\theta} = \overline{X}$ — оценка, $\widehat{\theta} = 3.8$ — реализация оценки

Реализации оценки параметра по бутстрепным выборкам ($B = 100$):

4.2, 4.2, 2.6, 3.2, 4.2, 3.8, 3.2, 3.6, 3.6, 3.4,
3.8, 4.4, 3.6, 3.2, 4.6, 4.2, 3.0, 3.2, 4.0, 3.0,
4.0, 2.4, 3.4, 3.8, 2.0, 3.0, 4.6, 3.2, 3.6, 3.6,
...



1. **Нормальный интервал**

   $\widehat{\theta} = 3.8,\ v_{boot} = 0.394,\ z_{0.975} = 1.96$

   $(3.8 \pm 1.96 \cdot \sqrt{0.394}) = (2.57,\ 5.03)$

2. **Центральный интервал**

   $B(1+\alpha)/2 = 100 \cdot 0.975 = 97.5,\ B(1-\alpha)/2 = 100 \cdot 0.025 = 2.5$

   $\theta^*_{(\lceil 97.5 \rceil)} = 5, \quad \theta^*_{(\lfloor 2.5 \rfloor)} = 2.4$

   $(2 \cdot 3.8 - 5,\ 2 \cdot 3.8 - 2.4) = (2.6,\ 5.2)$

3. **Квантильный интервал**

   $(2.4,\ 5)$

Бутстрепные тесты в АБ-тестировании

$X_1, ..., X_n$ и $Y_1, ..., Y_m$ — произвольные выборки.

$\mathsf{H}_0\colon \mathsf{E}X_1 = \mathsf{E}Y_1$ *vs.* $\mathsf{H}_1\colon \mathsf{E}X_1 \ \{<, \neq, >\}\ \mathsf{E}Y_1$

Рассмотрим статистику $T = (X, Y)$

Возможные проблемы

- Распределение статистики недостаточно похоже на нормальное распред., например, мало данных или слишком тяжелые хвосты.
- В выборке есть зависимости, вследствие чего дисперсия среднего оценивается неправильно.

Можно применить бутстреп.

1. Получить бутстрепную выборку статистик $T = (X, Y)$
2. Построить бутстрепный доверительный интервал и сравнить с 0.


ВСЁ!