O que fazer quando a amostra é pequena?

Método de Reamostragem Boostrap

ESTAT0090 – Estatística Computacional

Prof. Dr. Sadraque E. F. Lucena
sadraquelucena@academico.ufs.br

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Motivação

Fazer inferências com amostras pequenas é muito difícil, principalmente quando a distribuição da população não é conhecida. Nesses casos, os métodos estatísticos tradicionais podem não ser adequados ou aplicáveis. Uma alternativa é usar o método bootstrap.

Objetivos da aula

- Apresentar o método de reamostragem Bootstrap como uma alternativa para fazer inferência em situações com amostras pequenas.
- Ensinar a usar o método Bootstrap para estimar a distribuição, o erro padrão, o viés e calcular intervalos de confiança para estimadores estatísticos.
- Demonstrar a aplicação do Bootstrap com exemplos práticos, comparando seus resultados com os de métodos analíticos tradicionais (quando disponíveis).
- Introduzir o uso do pacote `boot` no R para realizar a reamostragem Bootstrap.

Bootstrap: Introdução

- Quando se deseja fazer inferência sobre um estimador, é essencial conhecer a sua distribuição.
- Há duas formas de determinar a distribuição do estimador:
  1. Conhecendo a distribuição original dos dados;
  2. Obtendo aproximação usando resultados assintóticos quando o tamanho da amostra é suficientemente grande.
- No entanto, quando lidamos com amostras pequenas e não temos informações suficientes sobre a distribuição da população da qual a amostra foi retirada, os métodos estatísticos tradicionais podem não ser apropriados. É aí que entram os métodos bootstrap.
- Bootstrap envolve o tratamento da amostra que temos como uma representação aproximada da população. Com base nessa amostra, criamos várias amostras artificiais e aplicamos o estimador, obtendo uma estimativa para cada uma dessas amostras artificiais.

Bootstrap: Introdução

- Usando essas estimativas artificiais, podemos construir uma aproximação empírica da distribuição de probabilidade do estimador.
- Dessa forma, o método bootstrap nos permite estimar a variabilidade e a incerteza associadas ao nosso estimador, mesmo quando não conhecemos a distribuição exata da população subjacente.
- Ele é particularmente útil em situações em que os métodos estatísticos clássicos não podem ser aplicados devido ao tamanho pequeno da amostra ou à falta de informações sobre a população.

Bootstrap: Introdução

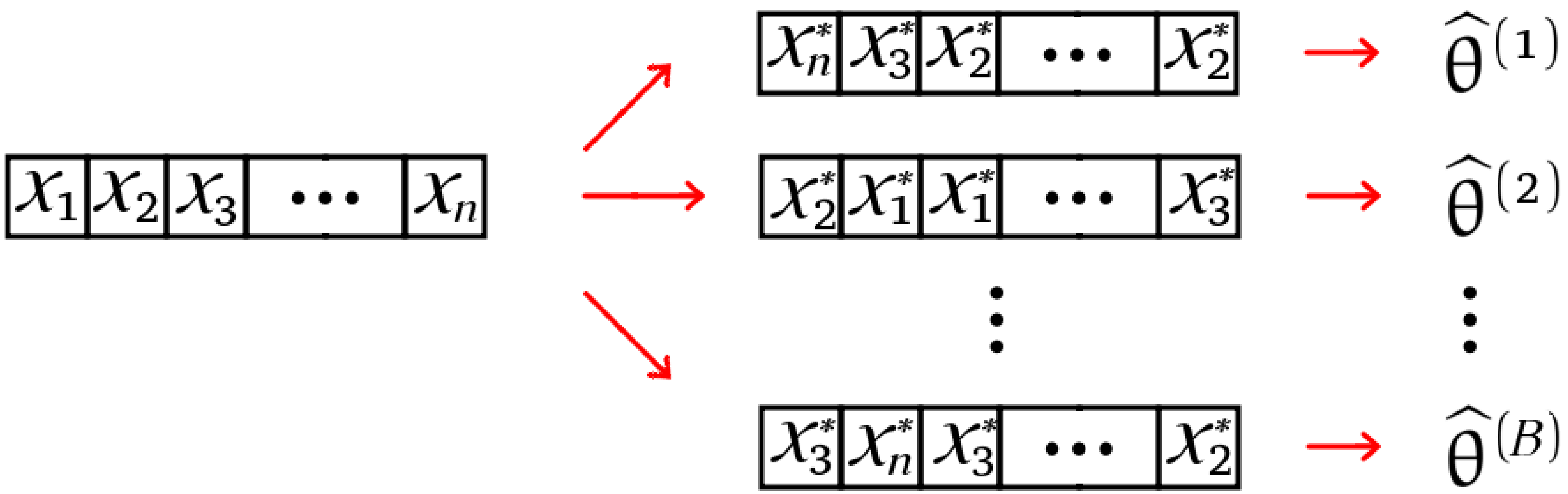
- O método Boostrap foi apresentado de forma sistematizada por Efron em 1979.
- Principais aplicações de bootstrap:
  - Avaliar propriedades da distribuição de estimadores para seleção, ajuste de vício, etc.
  - Substituir ou aprimorar a adequação de abordagens assintóticas em amostras pequenas: intervalos de confiança, testes de hipótese.

Bootstrap: funcionamento

- Suponha que θ é o parâmetro de interesse (θ pode ser um vetor) e $\widehat{\theta}$ é um estimador de θ. Então a estimativa bootstrap da distribuição de θ (distribuição empírica) é obtida da seguinte forma:
  - Para cada réplica bootstrap, indexada por $b = 1, \ldots, B$:
    a. Gere a amostra $x^{*(b)} = x_1^*, \ldots, x_n^*$ (mesmo tamanho da amostra original);
    b. Calcule $\widehat{\theta}_b^*$ a partir da amostra $x^{*(b)}$.
  - A distribuição empírica de θ será $\widehat{\theta}_1^*, \ldots, \widehat{\theta}_B^*$.
- Se a amostra x_b^* for gerada a partir de uma amostragem com reposição dos dados originais, o método é chamado bootstrap não paramétrico.
- Se a amostra x_b^* for gerada a partir de uma distribuição conhecida, o método é chamado bootstrap paramétrico.

Bootstrap: funcionamento

- No caso do bootstrap não paramétrico (não se sabe a distribuição dos dados):
  - $x = (x_1, \ldots, x_n)$ é a amostra original da qual foi obtido $\widehat{\theta}$.
    - Para cada réplica bootstrap, indexada por $b = 1, \ldots, B$:
      a. Gere a amostra $x^{*(b)} = x_1^*, \ldots, x_n^*$ a partir de amostragem com reposição de x;
      b. Calcule $\widehat{\theta}^{(b)}$ para a amostra $x^{*(b)}$.
    - A distribuição empírica de θ será $\widehat{\theta}_1^*, \ldots, \widehat{\theta}_b^*$.



Bootstrap: funcionamento

- No caso do bootstrap paramétrico: (a distribuição dos dados é $\mathfrak{D}(\gamma)$, mas não se sabe o valor de γ)
  - $x = (x_1, \ldots, x_n)$ é a amostra original da qual foi obtido $\widehat{\theta}$.

  1. Obtenha a estimativa do parâmetro desconhecido da distribuição, $\widehat{\gamma}$.
  2. Para cada réplica bootstrap, indexada por $b = 1, \ldots, B$:

  a. Gere a amostra $x^{*(b)} = x_1^*, \ldots, x_n^*$ com distribuição $\mathfrak{D}(\widehat{\gamma})$;

     b. Calcule $\widehat{\theta}_b^*$ para a amostra $x^{*(b)}$.

- A distribuição empírica de θ será $\widehat{\theta}_1^*, \ldots, \widehat{\theta}_B^*$.

Estimação bootstrap do erro padrão

- A estimativa bootstrap do erro padrão de um estimador $\widehat{\theta}$ é o desvio padrão amostraldas réplicas bootstrap $\widehat{\theta}^{(1)}, \ldots, \widehat{\theta}^{(B)}$

$$dp(\widehat{\theta}^{*}) = \sqrt{\frac{1}{B-1}\sum_{b=1}^{B}\left(\widehat{\theta}_b^{*} - \overline{\widehat{\theta}^{*}}\right)^2},$$

em que

$$\overline{\widehat{\theta}^{*}} = \sum_{b=1}^{B}\widehat{\theta}_b^{*}.$$

- Segundo Efron e Tibishirani, o número de réplicas necessárias para boa estimação do erro padrão não pe grande.
- $B = 50$ geralmente é grande o suficiente e raramente $B > 200$ é necessário (para intervalos de confiança esse número é maior).

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Estimação bootstrap do erro padrão

- Para ilustrar a simplicidade do bootstrap, usaremos essa técnica para obter o erro padrão em uma situação muito simples, na qual sabemos como calcular um erro padrão analiticamente.
- Dessa forma, podemos comparar o resultado obtido pelo bootstrap com o obtido pela fórmula analítica.
- Normalmente usaremos o bootstrap em situações em que não temos um erro padrão analítico disponível.

Exemplo 17.1

Gere uma amostra de tamanho 100 de $X \sim N(\mu = 0, \sigma^2 = 100)$. Determine o erro padrão e estime-o via bootstrap não paramétrico e paramétrico para comparação.

- O verdadeiro erro padrão da média amostral é $dp(\overline{X}) = \frac{\sigma}{\sqrt{n}} = \frac{10}{\sqrt{100}} = 1$
- Vejamos como ficam as estimativas via bootstrap não paramétrico e paramétrico.

Exemplo 17.1

```r
# fixando a semente para reprodutibilidade
set.seed(61231601)

# Amostra
n <- 100  # tamanho da amostra
amostra <- rnorm(n, mean = 0, sd = 10)

# Erro padrão amostral
( ep <- sd(amostra)/sqrt(n) )
```

```
[1] 0.9800282
```

O pacote boot

- O erro padrão botstrap não paramétrico pode ser obtido no R usando a função `boot()` do pacote `boot`.
- O Exemplo 17.1 pode ser refeito usando o código abaixo:

```
### Usando o pacote "boot"
media.boot <- function(x, i) mean(x[i])

library(boot)
boot(data = amostra, statistic = media.boot, R = 200)
```

```
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP


Call:
boot(data = amostra, statistic = media.boot, R = 200)


Bootstrap Statistics :
     original     bias    std. error
t1* 0.8863115 0.1178033   0.9650515
```

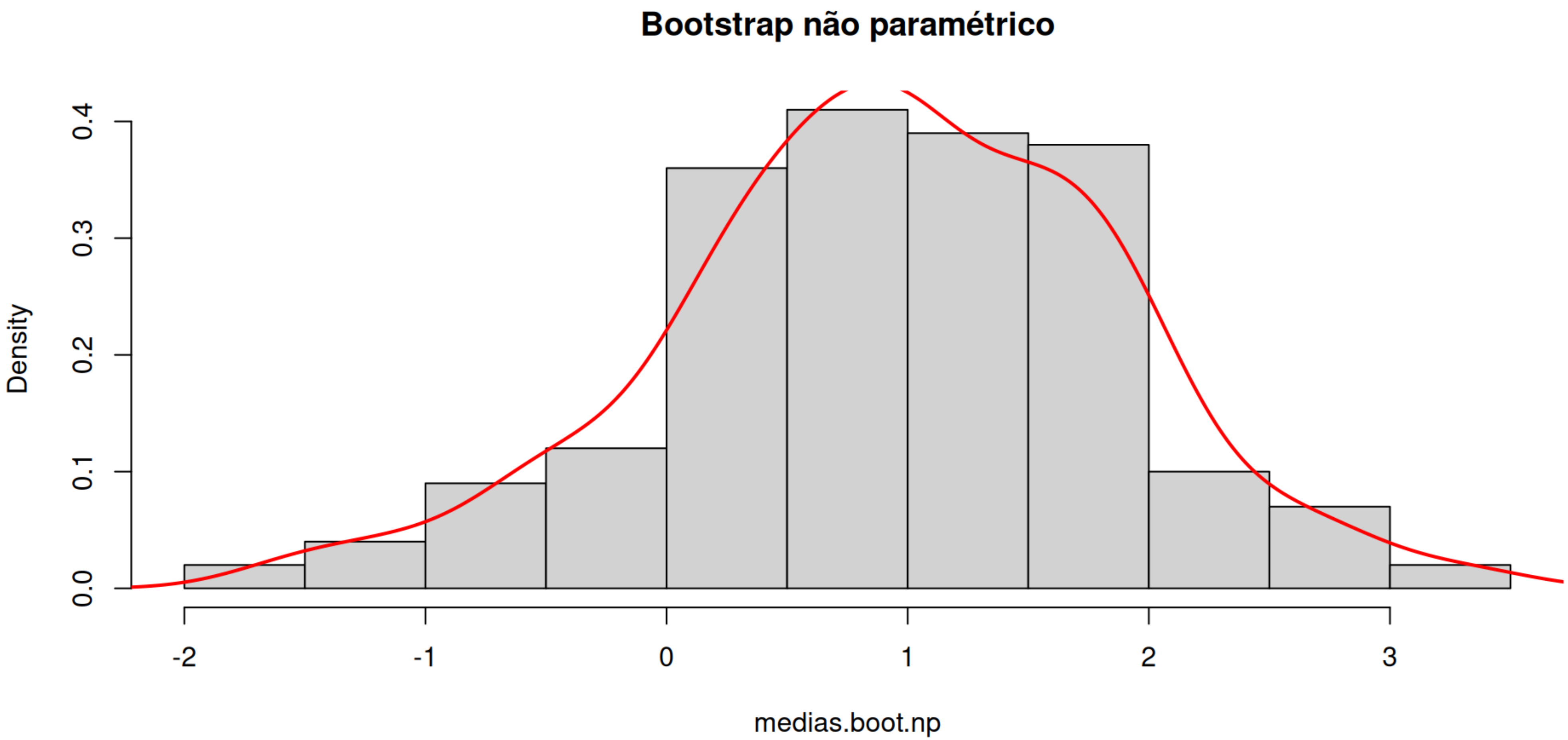
Exemplo 17.1

```
B <- 200 # número de réplicas bootstrap

# função que obtem uma amostra bootstrap não paramétrica e calcula a m
media.np <- function(x) {
  amstr <- sample(x, size = n, replace = TRUE)
    return(mean(amstr))
}

medias.boot.np <- replicate( B, media.np(amostra) )

# Estimativa do erro padrão
( ep.boot.np <- sd(medias.boot.np) )
```

```
[1] 0.9211583
```

Exemplo 17.1

```
hist(medias.boot.np, freq = FALSE,
     main = "Bootstrap não paramétrico")
lines(density(medias.boot.np), col = "red", lwd = 2)
```



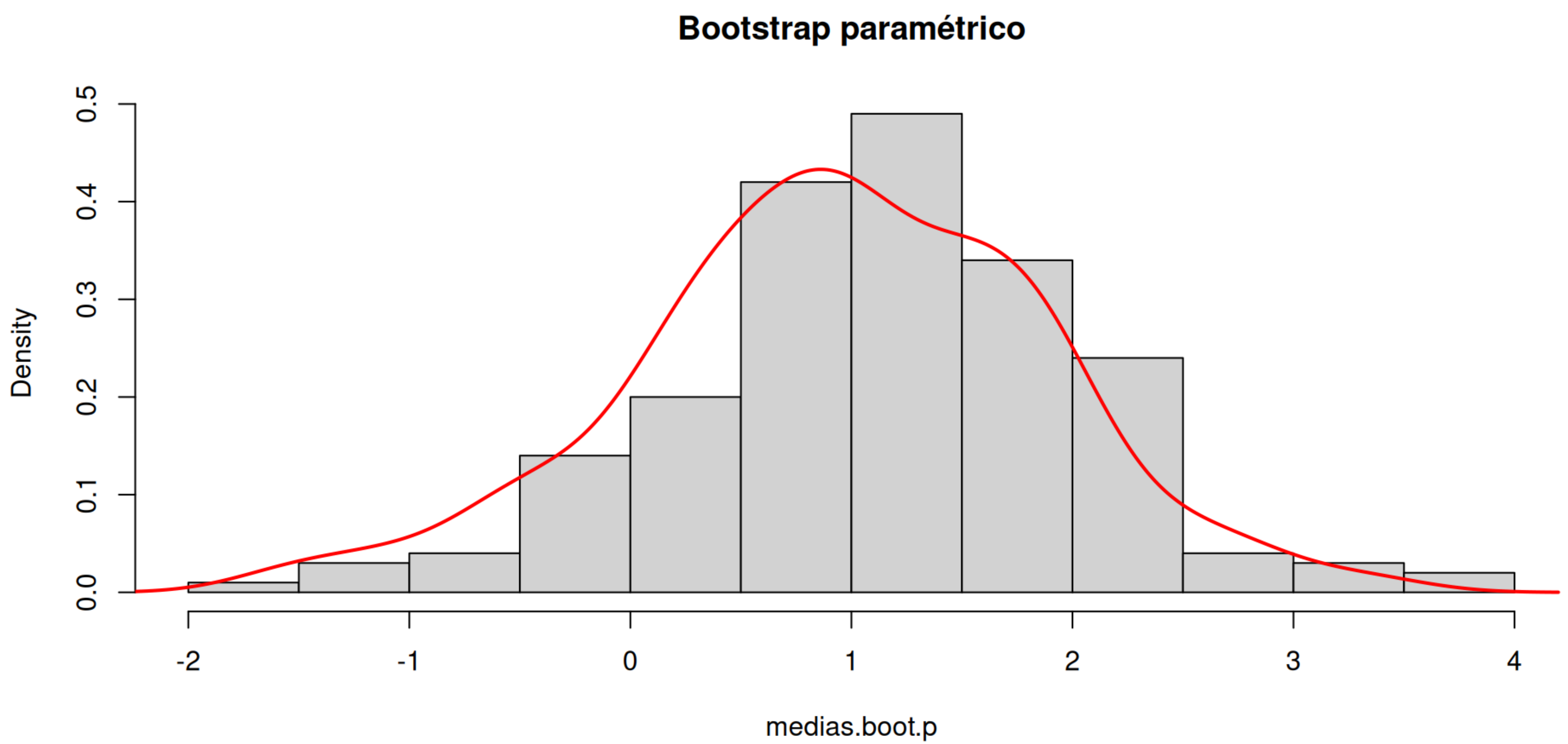
Exemplo 17.1

```r
## Bootstrap paramétrico
B <- 200 # número de réplicas bootstrap

# função que obtem uma amostra bootstrap paramétrica e calcula a média
media.p <- function(x) {
  m <- mean(x) # media
    dp <- sd(x)  # desvio padrão

    # amostra bootstra paramétrica
    amstr <- rnorm(n, mean = m, sd = dp)
    return(mean(amstr))
}

medias.boot.p <- replicate( B, media.p(amostra) )

# Estimativa do erro padrão
sd(medias.boot.p)
```

```
[1] 0.9090239
```

Exemplo 17.1

```
hist(medias.boot.p, freq = FALSE,
     main = "Bootstrap paramétrico")
lines(density(medias.boot.np), col = "red", lwd = 2)
```



Estimação do viés via bootstrap

- Se $\widehat{\theta}$ é um estimador não viesado para θ, então $E[\widehat{\theta}] = \theta$. O viés de um estimador $\widehat{\theta}$ de θ é

$$B[\widehat{\theta}] = E[\widehat{\theta} - \theta] = E[\widehat{\theta}] - \theta$$

- Se obtivermos várias estimativas bootstrap $(\widehat{\theta}^{(1)}, \ldots, \widehat{\theta}^{(B)})$ para compreender a distribuição de $\widehat{\theta}$, então a estimativa de viés bootstrap é

$$\widehat{B}[\widehat{\theta}] = \overline{\widehat{\theta}^{*}} - \widehat{\theta},$$

em que $\widehat{\theta}$ é a estimativa calculada da amostra original.

- Valores positivos de viés indicam que, em média, tende a sobrestimar θ.

Correção de viés via bootstrap

- Se um estimador é viesado gostaríamos de "corrigir" este estimador fazendo

$$\theta - B[\widehat{\theta}].$$

- Se usarmos uma estimativa bootstrap do viés, temos:

$$\theta - \widehat{B}[\widehat{\theta}].$$

- Assim, uma estimativa $\widehat{\theta}^c$ para θ corrigida pelo viés é

$$\begin{aligned}\widehat{\theta}^c &= \widehat{\theta} - \widehat{B}[\widehat{\theta}] \\ &= \widehat{\theta} - \left(\overline{\widehat{\theta}^*} - \widehat{\theta}\right) \\ &= 2\widehat{\theta} - \overline{\widehat{\theta}^*},\end{aligned}$$

  ou seja, a estimativa corrigida é dada pelo dobro da original subtraída da médas das estimativas das amostras bootstrap.

Exemplo 17.2

- Vamos estimar o viés de S^2 usando bootstrap em uma amostra de tamanho 40 da $N(\mu = 5, \sigma^2 = 4)$.

```
# Fixando a semente para reprodutibilidade
set.seed(61231801)

# Amostra
n <- 100  # tamanho da amostra
dados <- rnorm(n, mean = 5, sd = 2)

# Variância da amostra
( var.dados <- var(dados) )
```

```
[1] 3.856463
```

Exemplo 17.2

```r
## Bootstrap não paramétrico
B <- 1000 # número de réplicas bootstrap

# função que obtem uma amostra bootstrap não
# paramétrica e calcula a variância
variancia.boot <- function(x) {
  amstr <- sample(x, size = n, replace = TRUE)
  return(var(amstr))
}

var.boot.np <- replicate( B, variancia.boot(dados) )

# Estimativa bootstrap da variância
( var.np <- mean(var.boot.np) )
```

```
[1] 3.822395
```

Exemplo 17.2

```
# Viés
( vies <- var.np - var.dados )
```

```
[1] -0.03406886
```

```
# Estimativa corrigido o viés por bootstrap
( est <- 2*var.dados - var.np )
```

```
[1] 3.890532
```

```
## Usando a função "boot"
var.amostral <- function(x, i)
  return( var(x[i]) )

( var_boot <- boot(dados, var.amostral, B) )
```

```
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP


Call:
boot(data = dados, statistic = var.amostral, R = B)


Bootstrap Statistics :
```

Intervalos de confiança bootstrap

Intervalo percentil

- Este é o intervalo de confiança bootstrap mais simples.
- Se quisermos obter um intervalo com 95% de confiança, o algoritmo é o seguinte:
  1. Geramos B estimativas bootstrap $\widehat{\theta}^*_1, \ldots, \widehat{\theta}^*_B$
  2. Ordenamos essas estimativas
  3. Os limites do intervalo serão os valores correspondentes aos percentis 2,5% e 97,5%.
- Ou seja, o intervalo com $100(1-\alpha)\%$ de confiança é

$$\left(\widehat{\theta}^*_{\alpha/2}, \widehat{\theta}^*_{1-\alpha/2}\right)$$

Exemplo 17.3

Obtenha um intervalo de confiança bootstrap de 95% para a variância do Exemplo 17.2 usando o método percentil.

```
quantile(var.boot.np, probs = c(.25, .975))
```

```
     25%    97.5% 
3.492012 4.819677 
```

```
# Usando a função boot.ci
boot.ci(var_boot, conf = 0.95, type = "perc")
```

```
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL : 
boot.ci(boot.out = var_boot, conf = 0.95, type = "perc")

Intervals : 
Level     Percentile     
95%   ( 2.969,  4.732 )  
Calculations and Intervals on Original Scale
```

Intervalos de confiança bootstrap

Outros intervalos bootstrap

- Intervalo normal padrão (usa o erro padrão bootstrap)
- Bootstrap-t (gera valores t artificiais)
- Básico (usa os percentis com viés corrigidos)
- BCa (melhor intervalo de confiança, mas precisa de muitas réplicas)

- Para usá-los na função `boot.ci`, use o argumento `type = "all"`

Exemplo 14.4

Obtenha intervalos de confiança bootstrap de 95% para a variância do Exemplo 17.2 considerando todos os cinco métodos.

```
# Usando a função boot.ci
boot.ci(var_boot, conf = 0.95, type = "all")
```

```
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 1000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = var_boot, conf = 0.95, type = "all")

Intervals :
Level      Normal              Basic
95%   ( 2.975,  4.784 )   ( 2.981,  4.744 )

Level     Percentile            BCa
95%   ( 2.969,  4.732 )   ( 3.039,  4.877 )
Calculations and Intervals on Original Scale
```

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE

Exemplo 17.5

Os dados abaixo correspondem à notas obtidas na admissão em uma universidade americana (LSAT) e o coeficiente de rendimento médio ao final do curso (GPA).

LSAT	576	635	558	578	666	580	555	661	651	605	653	575	545
GPA	339	330	281	303	344	307	300	343	336	313	312	274	276

Obtenha a correlação amostral entre as duas variáveis. Calcule uma estimativa bootstrap para o viés e o erro padrão dessa correlação. Obtenha também intervalos de confiança boostrap. Use boostrap não paramétrico e considere $B = 2000$.

- Esses dados pertencem ao pacote `bootstrap` e chama-se `law`.

Exemplo 17.5

```
# Os dados estão no banco 'law' do pacote 'bootstrap'
library(bootstrap)
law
```

```
   LSAT  GPA
1   576 3.39
2   635 3.30
3   558 2.81
4   578 3.03
5   666 3.44
6   580 3.07
7   555 3.00
8   661 3.43
9   651 3.36
10  605 3.13
11  653 3.12
12  575 2.74
13  545 2.76
14  572 2.88
15  594 2.96
```

```
# Definições para o bootstrap
B <- 2000           # número de réplicas
n <- nrow(dados) # tamanho da amostra
```

```r
R <- numeric(B)  # guardará as estimativas bootstrap

# calcula a correlação entre as colunas 1 e 2
r <- function(x, i)
      cor(x[i,1], x[i,2])
```

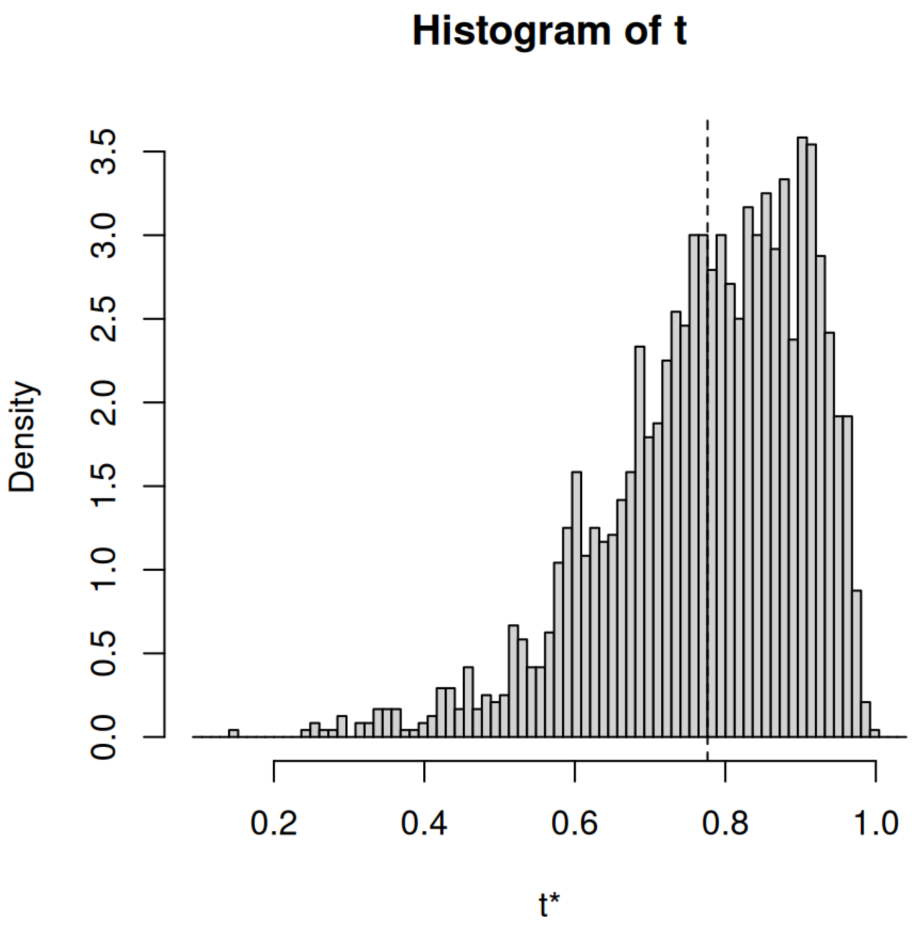
Exemplo 17.5

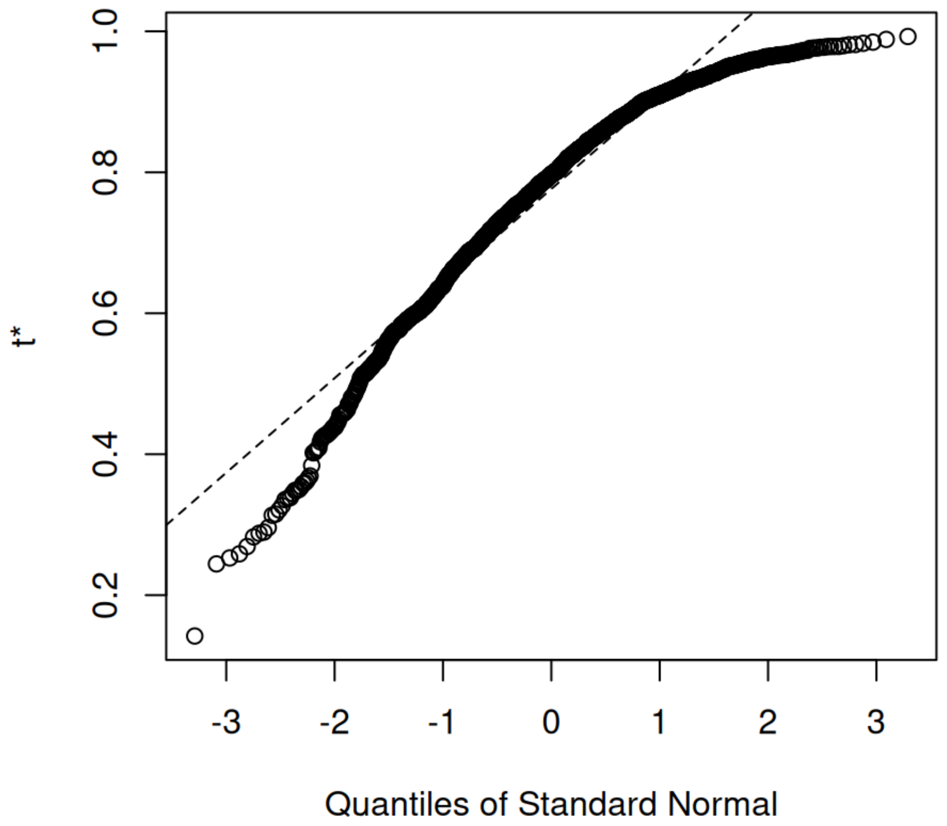
```r
library(boot)   # para a função boot
obj <- boot(data = law, statistic = r, R = 2000)
obj
```

```
ORDINARY NONPARAMETRIC BOOTSTRAP


Call:
boot(data = law, statistic = r, R = 2000)


Bootstrap Statistics :
     original        bias    std. error
t1* 0.7763745 2.340988e-05   0.1342302
```

Exemplo 17.5

```
plot(obj) # distribuição empírica
```





Exemplo 17.5

```
## Acessando os valores calculados
y <- as.vector(obj$t) # estimativas de bootstrap
cor.amostra <- r(law) # correlação dos dados
mean(y) - cor.amostra  # viés
```

```
[1] 2.340988e-05
```

```
sd(y)  # erro padrão
```

```
[1] 0.1342302
```

```
# correlação com viés corrigido
2*cor.amostra - mean(y)
```

```
[1] 0.7763511
```

Exemplo 17.5

```r
# intervalos de confiança
boot.ci(obj, conf = 0.95, type = "all")
```

```
BOOTSTRAP CONFIDENCE INTERVAL CALCULATIONS
Based on 2000 bootstrap replicates

CALL :
boot.ci(boot.out = obj, conf = 0.95, type = "all")

Intervals :
Level      Normal              Basic
95%   ( 0.5133,  1.0394 )   ( 0.5900,  1.1028 )

Level     Percentile            BCa
95%   ( 0.4499,  0.9628 )   ( 0.2878,  0.9364 )
Calculations and Intervals on Original Scale
Some BCa intervals may be unstable
```

Ganhos da aula

- Conehcimento sobre a construção e interpretação de intervalos de confiança bootstrap.
- Conhecimento sobre estimação e corrção de viés de estimadores usando o método Bootstrap.
- Domínio do uso do pacote `boot` no R para aplicar o Bootstrap em problemas reais.
- Compreensão da diferença entre bootstrap paramétrico e não paramétrico e quando usar cada um.

Fim

Aula baseada no material “Métodos Computacionais Aplicados à Estatística Implementação no Software R” de Cristiano de Carvalho Santos.