FACULTAD DE INGENIERÍA

UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA URUGUAY

Inferencia Estadística

Breve Repaso

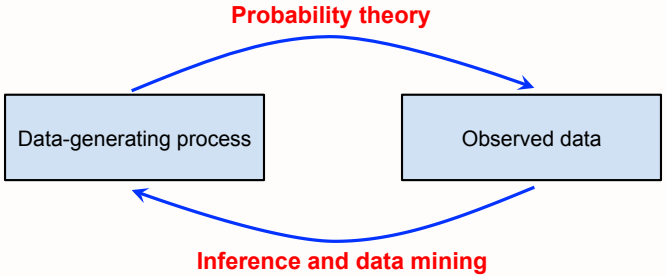
Paola Bermolen

paola@fing.edu.uy

28 de septiembre de 2022

Inferencia estadística y modelos

Probabilidad e Inferencia



- Teoría de la probabilidad es un formalismo para manejar la incertidumbre
  - Dado un proceso de generación de datos, ¿cuáles son las propiedades de los resultados?
- Inferencia estadística trata al problema inverso
  - Dados los resultados ¿qué podemos decir del proceso de generación de dichos resultados?

Inferencia estadística

- Inferencia estadística refiere al proceso por el cual
  - $\Rightarrow$ Dadas observaciones $\mathbf{x} = [x_1, \ldots, x_n]^T$ de $X_1, \ldots, X_n \sim F$
  - $\Rightarrow$ Se busca extraer información sobre la distribución F
- Ej: Inferir un atributo de F como su media
- Ej: Inferir la CDF F completa, o la densidad PDF $f = F'$
- Muchas veces las observaciones son de la forma (y_i, x_i), $i = 1, \ldots, n$
  - $\Rightarrow$ Y es el resultado o respuesta y X es el predictor o atributo
- P: ¿Cuál es la relación entre las variables aleatorias (VAs) Y and X?
- Ej: Aprender $\mathbb{E}\left[Y \,\middle|\, X = x\right]$ como función de x
- Ex: Predecir un valor no observado y_* a partir del valor $X_* = x_*$

Modelos

- Un modelo estadístico especifica un conjunto $\mathcal{F}$ de CDFs al cual F puede pertenecer
- Un modelo paramétrico es de la forma $\mathcal{F} = \{f(x;\theta) : \theta \in \Theta\}$
  - Parámetro(s) θ es desconocido y toma valores en un espacio de parámetros Θ
  - Espacio Θ tiene $\dim(\Theta) < \infty$, o no creciente con el tamaño de la muestra n
- Ej: Datos vienen de una distribución Gaussiana

$$\mathcal{F}_N = \left\{ f(x;\mu,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}},\ \mu \in \mathbb{R},\ \sigma > 0 \right\}$$

  Modelo paramétrico con dos parámetros desconocidos: $\boldsymbol{\theta} = [\mu, \sigma]^T$ y $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}_+$
- Un modelo no paramétrico tiene $\dim(\Theta) = \infty$, o $\dim(\Theta)$ crece con n
- Ej: $\mathcal{F}_{tot} = \{\text{Todas las CDFs } F\}$

Modelos y problemas de inferencia

- Dada una muestra independiente $\mathbf{x} = [x_1, \ldots, x_n]^T$ de $X_1, \ldots, X_n \sim F$

  $\Rightarrow$ usualmente la inferencia estadística se aplica en contexto de modelos

Ej: Estimación paramétrica unidimensional

- Sean observaciones Bernoulli con parámetro$p$
- El problema es estimar p (i.e., the mean)

Ej: Estimación paramétrica bidimensional

- Sean observacionesc con PDF $f \in \mathcal{F}_N$, i.e., Gaussianos
- El problema es estimar los parámetros μ y σ
- Quizás interese solo μ, y σ se considera como un parámetro extra

Ej: Estimación no paramétrica de la CDF

- El problema es estimar F asumiendo solamente que $F \in \mathcal{F}_{Tot} = \{\text{Todas las CDFs } F\}$

Modelos de regresión

- Sean observaciones de la forma $(Y_1, X_1), \ldots, (Y_n, X_n) \sim F_{YX}$

  $\Rightarrow$ El objetivo es aprender la relación entre las VAs Y and X

- Un enfoque típico es modelar la función de regresión

$$r(x) := \mathbb{E}\left[Y \,\middle|\, X = x\right] = \int_{-\infty}^{\infty} y f_{Y|X}(y|x) dy$$

  $\Rightarrow$ Equivalente al modelo de regresión $Y = r(X) + \epsilon$, $\mathbb{E}[\epsilon] = 0$

- Ej: Modelo de regresión lineal paramétrica

$$r \in \mathcal{F}_{Lin} = \{r : r(x) = \beta_0 + \beta_1 x\}$$

- Ej: Modelo de regresión lineal no-paramétrica asumiendo solo regularidad

$$r \in \mathcal{F}_{Sob} = \left\{r : \int_{-\infty}^{\infty} (r''(x))^2 dx < \infty\right\}$$

Regresión, predicción y clasificación

- Dada una muestra $(y_1, x_1), \ldots, (y_n, x_n)$ from $(Y_1, X_1), \ldots, (Y_n, X_n) \sim F_{YX}$
  - Ej: x_i es la presión en sangre del individuo i, y_i años de vida
- Modelar la relación entre Y and X a través de $r(x) = \mathbb{E}\left[Y \,\middle|\, X = x\right]$

  $\Rightarrow$ P: ¿ Problemas clásicos de inferencia en este contexto?

Ej: Regresión o ajuste de curvas

- El problema es estimar la función de regresión $r \in \mathcal{F}$

Ej: Predicción

- El objetivo es predecir Y_* para un nuevo individuo en base a su $X_* = x_*$
- Si se tiene una estimación de la regresión $\hat{r}$, podemos definir $y_* := \hat{r}(x_*)$

Ex: Clasificación

- Las VAs Y_i pueden ser discretas , e.g. vive o muere codificados como ± 1
- El problema de predicción en este caso se denomina clasificación

Conceptos fundamentales en inferencia

1. Inferencia estadística y modelos
2. Estimación puntual, intervalos de confianza y test de hipótesis
3. Tutorial 1: Inferencia sobre la media
4. Tutorial 2: Inferencia por regresión lineal

Estimadores puntuales

- Estimación puntual refiere a un único "best guess" sobre F
- Ej: Estimar el parámetro β en un modelo de regresión lineal

$$\mathcal{F}_{Lin} = \left\{ r : r(\mathbf{x}) = \beta^T \mathbf{x} \right\}$$

- **Def:** Dada la muestra $\mathbf{x} = [x_1, \ldots, x_n]^T$ from $X_1, \ldots, X_n \sim F$, un estimador puntual $\hat{\theta}$ del parámetro θ es alguna función

$$\hat{\theta} = g(X_1, \ldots, X_n)$$

  $\Rightarrow$ El estimador $\hat{\theta}$ se calcula a partir de la muestra y es por tanto una VA.

  $\Rightarrow$ La distribución de $\hat{\theta}$ se denomina sampling distribution

- La estimación es el valor específico del estimador para una muestra dada $\mathbf{x}$

  $\Rightarrow$ Se suele escribir $\hat{\theta}_n$ en referencia explícita al tamaño de la muestra.

Sesgo, error estándar y error cuadrático medio

- **Def:** El sesgo de un estimador $\hat{\theta}$ está dado por $\text{bias}(\hat{\theta}) := \mathbb{E}\left[\hat{\theta}\right] - \theta$
- **Def:** El error estándar es el desvío estándar de $\hat{\theta}$

$$\text{se} = \text{se}(\hat{\theta}) := \sqrt{\text{var}\left[\hat{\theta}\right]}$$

$\Rightarrow$ En general, se depende de la distribución desconocida F, pero se puede estimar $\widehat{\text{se}}$

- **Def:** El error cuadrático medio (MSE) es una medida de la calidad de $\hat{\theta}$

$$\text{MSE} = \mathbb{E}\left[(\hat{\theta} - \theta)^2\right]$$

- Los valores esperados se toman respecto de la distribución

$$f(x_1, \ldots, x_n; \theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i; \theta)$$

Descomposición sesgo-varianza del MSE

Teorema

El $MSE = \mathbb{E}\left[(\hat{\theta} - \theta)^2\right]$ *se puede escribir como*

$$MSE = bias^2(\hat{\theta}) + \text{var}\left[\hat{\theta}\right]$$

Demostración.

- Sea $\bar{\theta} = \mathbb{E}\left[\hat{\theta}\right]$. Entonces

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[(\hat{\theta} - \theta)^2\right] &= \mathbb{E}\left[(\hat{\theta} - \bar{\theta} + \bar{\theta} - \theta)^2\right] \\
&= \mathbb{E}\left[(\hat{\theta} - \bar{\theta})^2\right] + 2(\bar{\theta} - \theta)\mathbb{E}\left[\hat{\theta} - \bar{\theta}\right] + (\bar{\theta} - \theta)^2 \\
&= \text{var}\left[\hat{\theta}\right] + \text{bias}^2(\hat{\theta})
\end{aligned}$$

- La última igualdad vale ya que $\mathbb{E}\left[\hat{\theta} - \bar{\theta}\right] = \mathbb{E}\left[\hat{\theta}\right] - \bar{\theta} = 0$

Propiedades deseables de los estimadores puntuales

- ¿Propiedades deseables para un estimador $\hat{\theta}$ del parámetro θ?
- **Def:** Un estimador es insesgado si $\text{bias}(\hat{\theta}) = 0$, i.e., si $\mathbb{E}\left[\hat{\theta}\right] = \theta$

  $\Rightarrow$ Un estimador insesgado es "acertado" en promedio
- **Def:** Un estimador es consistente si $\hat{\theta}_n \xrightarrow{p} \theta$, i.e. para todo $\epsilon > 0$

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{P}\left(|\hat{\theta}_n - \theta| < \epsilon\right) = 1$$

  $\Rightarrow$ Un estimador consistente converge a θ a medida que hay más datos
- **Def:** Un estimador insesgado es Normal asintóticamente si

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{P}\left(\frac{\hat{\theta}_n - \theta}{\mathrm{se}} \leq x\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-u^2/2} du$$

  $\Rightarrow$ Esto es, para muestras suficientemente grandes $\hat{\theta}_n \sim \mathcal{N}(\theta, \mathrm{se}^2)$

Ejemplo: lanzar una moneda

Ej: Se lanza la misma moneda n veces y se registra el resultado

- Se modelan las observaciones como $X_1, \ldots, X_n \sim \text{Ber}(p)$. ¿Estimación de p?
- La opción natural es el estimador dado por la media muestral/promedio

$$\hat{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

- Recordar que para $X \sim \text{Ber}(p)$: $\mathbb{E}[X] = p$ y $\text{var}[X] = p(1-p)$
- El estimador $\hat{p}$ es insesgado ya que

$$\mathbb{E}[\hat{p}] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}[X_i] = p$$

Ejemplo lanzamiento monedas (cont.)

- El error estándar es

$$\text{se} = \sqrt{\text{var}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i\right]} = \sqrt{\frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\text{var}\left[X_i\right]} = \sqrt{\frac{p(1-p)}{n}}$$

  $\Rightarrow$ Pero p es desconocido. Estimación del error estándar $\hat{\text{se}} = \sqrt{\frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}}$

- Dado que $\hat{p}_n$ es insesgado, resulta que $\text{MSE} = \mathbb{E}\left[(\hat{p}_n - p)^2\right] = \frac{p(1-p)}{n} \to 0$
  - Entonces $\hat{p}$ converge en sentido del error cuadrático, de donde $\hat{p}_n \xrightarrow{p} p$
  - Se deduce que $\hat{p}$ es un estimador consistente del parámetro p

- Además, $\hat{p}$ es asintóticamente Normal por el Teorema Central del Límite

Intervalos de confianza

- Estimación de regiones de Θ donde θ pertenece con probabilidad alta
- **Def:** Dada una muestra i.i.d $X_1, \ldots, X_n \sim F$, un $1 - \alpha$ intervalo de confianza del parámetro θ es un intervalo $C_n = (a, b)$, donde $a = a(X_1, \ldots, X_n)$ y $b = b(X_1, \ldots, X_n)$ son funciones de los datos tales que:

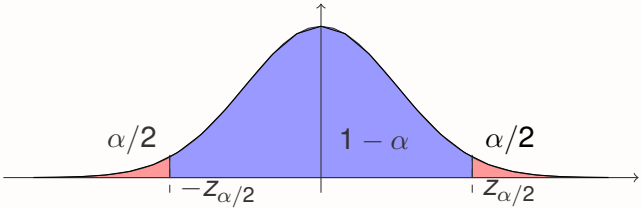
$$\mathrm{P}(\theta \in C_n) = 1 - \alpha, \quad \text{for all } \theta \in \Theta$$

  - $\Rightarrow$ En palabras, $C_n = (a, b)$ captura a θ con probabilidad $1 - \alpha$
  - $\Rightarrow$ El intervalo C_n se calcula a partir de la muestra y por tanto es aleatorio
- Se llama $1 - \alpha$ la cobertura del intervalo de confianza
- Ej: es común reportar 95 %-intervalos de confianza, i.e., $\alpha = 0{,}05$

A una lado de la distribución Normal

- Sea X una VA Normal estándar, i.e., $X \sim \mathcal{N}(0,1)$ con CDF $\Phi(x)$

$$\Phi(x) = \mathrm{P}(X \leq x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{x} e^{-\frac{u^2}{2}} du$$



- Se define $z_{\alpha/2} = \Phi^{-1}(1-(\alpha/2))$, i.e., el valor tal que

$$\mathrm{P}(X > z_{\alpha/2}) = \alpha/2 \text{ and } \mathrm{P}(-z_{\alpha/2} < X < z_{\alpha/2}) = 1-\alpha$$

Intervalos de confianza basados en la Normal

- Los buenos estimadores puntuales $\hat{\theta}_n$ son normales cuando $n \to \infty$, i.e., $\hat{\theta}_n \sim \mathcal{N}(\theta, \hat{\text{se}}^2)$

  $\Rightarrow$ Propiedad útil para construir intervalos de confianza de θ

Teorema

Supongamos que $\hat{\theta}_n \sim \mathcal{N}(\theta, \hat{\text{se}}^2)$ *cuando* $n \to \infty$. *Sea* Φ *la CDF de una Normal estándar y sea* $z_{\alpha/2} = \Phi^{-1}(1 - (\alpha/2))$. *Se define el intervalo*

$$C_n = (\hat{\theta}_n - z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}, \hat{\theta}_n + z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}).$$

Entonces $\mathrm{P}(\theta \in C_n) \to 1 - \alpha$, *as* $n \to \infty$

- Estos intervalos tienen la cobertura correcta solo aproximadamente (para valores grandes de n)

Demostración.

- Sea la VA normal centrada y escalada

$$X_n = \frac{\hat{\theta}_n - \theta}{\hat{\text{se}}}$$

- Por hipótesis $X_n \to X \sim \mathcal{N}(0,1)$ as $n \to \infty$. Entonces,

$$\begin{aligned} \mathrm{P}\left(\theta \in C_n\right) &= \mathrm{P}\left(\hat{\theta}_n - z_{\alpha/2}\hat{\text{se}} < \theta < \hat{\theta}_n + z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}\right) \\ &= \mathrm{P}\left(-z_{\alpha/2} < \frac{\hat{\theta}_n - \theta}{\hat{\text{se}}} < z_{\alpha/2}\right) \\ &\to \mathrm{P}\left(-z_{\alpha/2} < X < z_{\alpha/2}\right) = 1 - \alpha \end{aligned}$$

- La última igualdad vale por definición de $z_{\alpha/2}$

□

Ejemplo lanzamiento de moneda (una vez más...)

Ej: Dadas las observaciones $X_1, \ldots, X_n \sim \text{Ber}(p)$. ¿Estimación de p?

- Estudiamos propiedades del estimador media muestral/promedio

$$\hat{p} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

- Por el Teorema Central del Límite, se tiene que

$$\hat{p} \sim \mathcal{N}\left(p, \frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}\right) \text{ as } n \to \infty$$

- Entonces, un $1 - \alpha$ intervalo de confianza aproximado para p es

$$C_n = \left(\hat{p} - z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}}, \hat{p} + z_{\alpha/2}\sqrt{\frac{\hat{p}(1-\hat{p})}{n}}\right)$$

Test de Hipótesis

- Para test de hipótesis empezamos con alguna teoría de base que creemos es válida
  - Ej: Los datos proviene de una distribución Normal centrada
- P: ¿Los datos brindan evidencia suficiente para rechazar dicha teoría?
- La teoría a testear se llama hipótesis nula, y se escribe H_0

  $\Rightarrow$ Se plantea también una hipótesis alternativa a la nula, H_1
- Formalmente, dada una muestra i.i.d. $\mathbf{x} = [x_1, \ldots, x_n]^T$ from $X_1, \ldots, X_n \sim F$
  - **(i)** Se define un estadístico del test $T(\mathbf{x})$, i.e., una función de la muestra
  - **(ii)** Se define una región crítica (de rechazo) $\mathcal{R}$ de la forma

$$\mathcal{R} = \{\mathbf{x} : T(\mathbf{x}) > c\}$$

- Si los datos $\mathbf{x} \in \mathcal{R}$ se rechaza H_0, en otro caso decimos que no hay evidencia suficiente para rechazar H_0
- El problema es seleccionar un estadístico del test T y el valor crítico c

Testeando si una moneda es justa

Ej: Se considera el lanzamiento de una misma moneda n veces y se registran los resultados

- Modelamos los resultados como $X_1, \ldots, X_n \sim \text{Ber}(p)$. ¿Podemos saber si es justa la moneda?
- Sea H_0 la hipótesis nula de que la moneda es justa, y H_1 la alternativa
  $\Rightarrow$ Podemos escribir las hipótesis como $H_0 : p = 1/2$ versus $H_1 : p \neq 1/2$
- Consideramos el estadístico del test dado por

$$T(X_1, \ldots, X_n) = \left| \hat{p}_n - \frac{1}{2} \right| = \left| \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i - \frac{1}{2} \right|$$

- Parece razonable rechazar H_0 si $(X_1, \ldots, X_n) \in \mathcal{R}$, donde

$$\mathcal{R} = \{(X_1, \ldots, X_n) : T(X_1, \ldots, X_n) > c\}$$

- Veremos que esto es un Wald test, de donde $c = z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}$.

Tutorial 1: Inferencia sobre la media

Inferencia sobre la media

- Sea una muestra i.i.d de n observaciones $X_1, \ldots, X_n \sim F$
- P: ¿Cómo podemos hacer inferencia sobre la media $\mu = \mathbb{E}[X_1]$?

  $\Rightarrow$ Problema práctico y canónico en inferencia estadística
- Un estimador natural de μ es el promedio/ media muestral

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i$$

  $\Rightarrow$ Justificado ampliamente por la ley (fuerte) de los grandes números

$$\lim_{n \to \infty} \hat{\mu}_n = \mu \quad \text{casi seguramente}$$

- Es un ejemplo simple de estimador por método de los momentos (MM)...
- ...y también del estimador por máxima verosimilitud (MLE)

Método de los momentos

- En inferencia paramétrica queremos estimar $\boldsymbol{\theta} \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^p$ en

$$\mathcal{F} = \{f(x; \boldsymbol{\theta}) : \boldsymbol{\theta} \in \Theta\}$$

- Para $1 \leq j \leq p$, se define el *j*-ésimo momento de $X \sim F$ como

$$\alpha_j \equiv \alpha_j(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}\left[X^j\right] = \int_{-\infty}^{\infty} x^j f(x; \boldsymbol{\theta}) dx$$

- De la misma manera, el *j*-ésimo momento muestral es un etiamdor de α_j, esto es

$$\hat{\alpha}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} X_i^j$$

  $\Rightarrow$ El *j*-ésimo momento $\alpha_j(\boldsymbol{\theta})$ depende del parámetro desconocido $\boldsymbol{\theta}$

  $\Rightarrow$ Pero $\hat{\alpha}_j$ no despende ya que es, una función de la muestra solamente

Estimador por método de los momentos

- El primer método para estimación paramétrica es el método de los momentos

  $\Rightarrow$ EMM no son óptimos pero son típicamente muy sencillos de cacular

- **Def:** El estimador por método de los momentos (EMM) $\hat{\theta}_n$ es la solución al sistema

$$\begin{aligned} \alpha_1(\hat{\theta}_n) &= \hat{\alpha}_1 \\ \alpha_2(\hat{\theta}_n) &= \hat{\alpha}_2 \\ \vdots \quad & \vdots \quad \vdots \\ \alpha_p(\hat{\theta}_n) &= \hat{\alpha}_p \end{aligned}$$

  $\Rightarrow$ Es un sistema de p ecuaciones (no-lineales) con p incógnitas

- Ej: Volviendo a estimar la media μ, $p = 1$ y $\mu = \theta = \alpha_1(\theta)$ de donde

$$\hat{\mu}_n^{MM} = \hat{\alpha}_1 = \frac{1}{n}\sum_{i=1} X_i$$

Ejemplo: modelo de datos gaussianos

Ej: Supongamso que $X_1, \ldots, X_n \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, i.e., el modelo es $F \in \mathcal{F}_N$

- P: ¿Cuál es el EMM del vector de parámetros $\theta = [\mu, \sigma^2]^T$?
- Los primeros $p = 2$ momentos están dados por

$$\alpha_1(\theta) = \mathbb{E}[X_1] = \mu, \quad \alpha_2(\theta) = \mathbb{E}\left[X_1^2\right] = \sigma^2 + \mu^2$$

- El EMM $\hat{\theta}_n$ es la solución al siguiente sistema de ecuaciones

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

$$\hat{\sigma}_n^2 + \hat{\mu}_n^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i^2$$

- La solución es:

$$\hat{\mu}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i, \quad \hat{\sigma}_n^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(X_i - \hat{\mu}_n)^2$$

Estimador de máxima verosimilitud

- Aveces “el” método en estimación paramétrica es máxima verosimilitud
- Consideremos una muestra i.i.d. $X_1, \ldots, X_n$ fde una PDF $f(x; \theta)$
- La función de verosimilitud $\mathcal{L}_n(\theta) : \Theta \to \mathbb{R}_+$ se define como

$$\mathcal{L}_n(\theta) := \prod_{i=1}^{n} f(X_i; \theta)$$

  - $\Rightarrow \mathcal{L}_n(\theta)$ es la PDF conjunta de la muestra, vista como función de θ
  - $\Rightarrow$ La log-verosimilitud es $\ell_n(\theta) := \log \mathcal{L}_n(\theta)$

- **Def:** El estimador por máxima verosimilitud (MLE) $\hat{\theta}_n$ está dado por

$$\hat{\theta}_n = \arg\max_{\theta} \mathcal{L}_n(\theta)$$

- Muy útil: $\mathcal{L}_n(\theta)$ y $\ell_n(\theta)$ alcanzan su máximo en el mismo valor

Ejemplo: muestra de datos Bernoulli

- Supongamos $X_1, \ldots, X_n \sim \text{Ber}(p)$. ¿Cuál es el MLE de $\mu = p$?

  $\Rightarrow$ La densidad conjunta es $f(x; p) = p^x(1-p)^{1-x}$, $x \in \{0, 1\}$

- La función de verosimilitu es (definimos $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$)

$$\mathcal{L}_n(p) = \prod_{i=1}^n f(X_i; p) = \prod_{i=1}^n p^{X_i}(1-p)^{1-X_i} = p^{S_n}(1-p)^{n-S_n}$$

  $\Rightarrow$ La log-verosimilitud es $\ell_n(p) = S_n \log(p) + (n - S_n)\log(1-p)$

- El MLE $\hat{p}_n$ es la solución a la ecuación

$$\left.\frac{\partial \ell_n(p)}{\partial p}\right|_{p=\hat{p}_n} = \frac{S_n}{\hat{p}_n} - \frac{n - S_n}{1 - \hat{p}_n} = 0$$

- La solución es

$$\hat{\mu}_n^{ML} = \hat{p}_n = \frac{S_n}{n} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n X_i$$

Ejemplo: modelo de datos Gaussianos

- Supongamos $X_1, \ldots, X_n \sim \mathcal{N}(\mu, 1)$. ¿Cuále es el MLE de μ?
  - $\Rightarrow$ La PDF conjunta es $f(x;\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{ -\frac{(x-\mu)^2}{2} \right\}$, $x \in \mathbb{R}$
- La función de verosimilitud es (a menos de constantes independientes de μ)

$$\mathcal{L}_n(\mu) = \prod_{i=1}^{n} f(X_i;\mu) \propto \exp\left\{ -\sum_{i=1}^{n} \frac{(X_i-\mu)^2}{2} \right\}$$

  - $\Rightarrow$ La log-verosimilitud es $\ell_n(\mu) \propto -\sum_{i=1}^{n}(X_i-\mu)^2$
- TEI $\hat{\mu}_n$ es la solución a la ecuación

$$\left.\frac{\partial \ell_n(\mu)}{\partial \mu}\right|_{\mu=\hat{\mu}_n} = 2\sum_{i=1}^{n}(X_i - \hat{\mu}_n) = 0$$

- La solución es, una vez más, la media muestral

$$\hat{\mu}_n^{ML} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

Propiedades del MLE

- MLE tiene propiedades deseables bajo condiciones grales de la densidad f

P1) Consistencia: $\hat{\theta}_n \xrightarrow{p} \theta$ cuando el tamaño de la muestra n crece

P2) Equivariancia: Si $\hat{\theta}_n$ es el MLE de θ, entonces $g(\hat{\theta}_n)$ es el MLE de $g(\theta)$

P3) Normalidad asintótica: Para n grande, se tiene que $\hat{\theta}_n \sim \mathcal{N}(\theta, \hat{\text{se}}^2)$

P4) Eficiencia: Para n grande, $\hat{\theta}_n$ alcanza la cota inferior de Cramér-Rao lower

- Eficiencia significa estiamdor insesgado con varianza mínima
- Ej: Se puede usar el MLE para construir un intervalo de confianza para μ, i.e.,

$$C_n = \left(\hat{\mu}_n^{ML} - z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}, \hat{\mu}_n^{ML} + z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}\right)$$

$\Rightarrow$ Por Normalidad asintótica, $\text{P}(\mu \in C_n) \approx 1 - \alpha$ para n grande

$\Rightarrow$ Para el modelo $\mathcal{N}(\mu, 1)$, $\hat{\mu}_n^{ML} \pm \frac{z_{\alpha/2}}{\sqrt{n}}$ se tiene cobertura exacta

El test Wald

- Consider el siguiente test de hipótesis sobre la media μ

$$H_0 : \mu = \mu_0 \quad \text{versus} \quad H_1 : \mu \neq \mu_0$$

- Sea $\hat{\mu}_n$ la media muestral, con error estándar estimado $\hat{\text{se}}$
- **Def:** Dado $\alpha \in (0, 1)$, el test Wald rechaza H_0 cuando

$$T(X_1, \ldots, X_n) := \left| \frac{\hat{\mu}_n - \mu_0}{\hat{\text{se}}} \right| > z_{\alpha/2}$$

- Si H_0 es verdadera, $\frac{\hat{\mu}_n - \mu_0}{\hat{\text{se}}} \sim \mathcal{N}(0, 1)$ por el TCL

  $\Rightarrow$ Probabilidad de rechazar H_0 erróneamente no es más grande que α

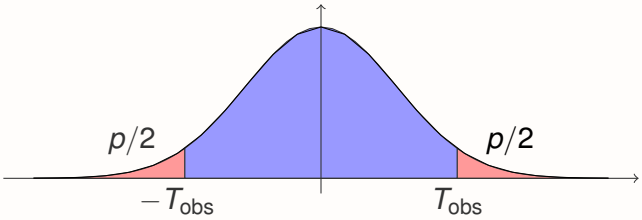
- El valor de α se llama nivel de significancia del test

El p-valor

- Reportar “rechazo H_0” o “ no rechazo H_0” para tal α no es tan informativo

  $\Rightarrow$ Podemos preguntar para cada α, si se rechaza o no a ese nivel

- Sea $T_{\text{obs}} := T(\mathbf{x})$ el valor del estadístico del test para la muestra observada



- La probabildiad $p := \mathrm{P}_{H_0}(|T(\mathbf{X})| \geq T_{\text{obs}})$ se llama p-value

  $\Rightarrow$ Valor más chico para el cual el test rechaza H_0

- Un p-valor chico ($< 0{,}05$) indica poca evidencia para soportar la hip. nula H_0

Tutorial 2: Inferencia por regresión lineal

Regresión Lineal

- Sean observaciones de la forma $(Y_1, X_1), \ldots, (Y_n, X_n) \sim F_{YX}$

  $\Rightarrow$ El objetivo es aprender la relación entre las VAs Y and X

- Un primer enfoque es modelar la función de regresión

$$r(x) = \mathbb{E}\left[Y \,\middle|\, X = x\right] = \int_{-\infty}^{\infty} y f_{Y|X}(y|x) dy$$

- El modelo simple de regresión lineal especifica que dado $X_i = x_i$

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

  - Las y_i's se modelan como muestras ruidosas de la recta $r(x) = \beta_0 + \beta_1 x$
  - Los errores ϵ_i son i.i.d., con $\mathbb{E}[\epsilon_i | X_i = x_i] = 0$ y $\text{var}[\epsilon_i | X_i = x_i] = \sigma^2$

- Bajo el modelo lineal, la regresión equivale a inferencia paramétrica

$$\hat{r}(x) \Leftrightarrow [\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1]^T$$

Regresión Lineal Múltiple

- Más general, supongamos que se observan datos $(y_1, \mathbf{x}_1), \ldots, (y_n, \mathbf{x}_n)$

  $\Rightarrow$ cada input $\mathbf{x}_i = [x_{i1}, \ldots, x_{ip}]^T$ es un vector $p \times 1$ de atributos

- El modelo de regresión lineal múltiple especifica que

$$y_i = \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j + \epsilon_i = \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{x}_i + \epsilon_i, \quad i = 1, \ldots, n$$

  - Típicamente $x_{i1} = 1$ para todo i, dado un término de corte
  - Los errores ϵ_i son i.i.d., con $\mathbb{E}[\epsilon_i | \mathbf{X}_i = \mathbf{x}_i] = 0$ y $\text{var}[\epsilon_i | \mathbf{X}_i = \mathbf{x}_i] = \sigma^2$

- De manera compacta(matricial) se representa como $\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$, definiendo

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & \ldots & x_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \ldots & x_{np} \end{bmatrix}, \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix}, \boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}$$

Estimador de Mínimos Cuadrados

- Un estimador clásico $\hat{\beta}$ minimiza la suma cuadrática de los residuos (RSS)

$$\text{RSS}(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta^T \mathbf{x}_i)^2 = \|\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta\|^2$$

$\Rightarrow$ Residuos (errores) son las distancias de y_i al hiperplano $r(\mathbf{x}) = \beta^T \mathbf{x}$

- **Def:** El estimador de mínimos cuadrados (LSE) $\hat{\beta}_n$ es la solución a

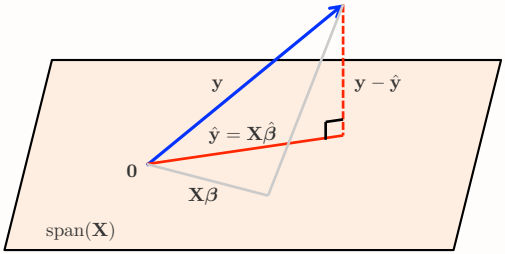
$$\hat{\beta}_n = \arg\min_{\beta} \text{RSS}(\beta)$$

- Resolviendo la optimización resultad que, el LSE es $\hat{\beta}_n = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$

$\Rightarrow$ Definido solo si $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ es invertible $\Leftrightarrow$ $\mathbf{X}$ tiene rango completo p

Geometría del LSE

- En mínimos cuadrados se busca el vector $\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X}\hat{\beta} \in \text{span}(\mathbf{X})$ más cercano a $\mathbf{y}$



- Solución: Proyección ortogonal de $\mathbf{y}$ sobre $\text{span}(\mathbf{X})$, i.e., (let $\mathbf{X} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T$)

$$\hat{\mathbf{y}} = P_{\mathbf{X}}(\mathbf{y}) = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T\mathbf{y}$$

- El residuo $\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}$ pertenece al complemento ortogonal $(\text{span}(\mathbf{X}))^{\perp}$

$\Longrightarrow$ Así tenemos que $\text{RSS}(\hat{\beta}) = \|\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}}\|^2$ is mínima

Propiedades del LSE

- LSE $\hat{\beta}_n = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$ es una combinación lineal de las VAs $\mathbf{y}$

P1) Insesgado: $\mathbb{E}\left[\hat{\beta}_n \,|\, \mathbf{X}\right] = \beta$ convar $\left[\hat{\beta}_n \,|\, \mathbf{X}\right] = \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$

P2) Consistencia: $\hat{\beta}_n \xrightarrow{p} \beta$ cuando el tamaño de la muestra n crece

P3) Normalidad asintótica: Para valores grandes de$n$, se tiene que $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1})$

P4) Si los errores $\epsilon \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \sigma^2\mathbf{I})$, entonces $\hat{\beta}_n \sim \mathcal{N}(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1})$ exactamente; y Eficiencia: No hay otro estimador insesgado de β con varianza más chica

- Ej: Se pued usar el LSE para construir intervalos de confianza para cada β_j, i.e.,

$$C_n = \left(\hat{\beta}_j - z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}(\hat{\beta}_j), \hat{\beta}_j + z_{\alpha/2}\hat{\text{se}}(\hat{\beta}_j)\right)$$

$\Rightarrow$ Dada la normalidad asintótica (o exacta), $\text{P}\left(\beta_j \in C_n\right) \approx 1 - \alpha$

$\Rightarrow$ Observa que $\hat{\text{se}}(\hat{\beta}_j) = \hat{\sigma}\sqrt{[(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}]_{jj}}$, donde $\hat{\sigma}^2 = \frac{RSS(\hat{\beta})}{n-p}$

Test de hipótesis y predicción

Ej: Sea el test de hipótesis respecto del parámetro β_j

$$H_0 : \beta_j = \beta_j^{(0)} \quad \text{versus} \quad H_1 : \beta_j \neq \beta_j^{(0)}$$

- Dada la normalidad asintótica (o exacta) del LSE, un test al nivel α es

$$\text{Rechazar } H_0 \text{ si } T_j := \left| \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j^{(0)}}{\hat{\text{se}}(\hat{\beta}_j)} \right| > z_{\alpha/2}$$

Ej: Podemos predecir un valor no observado $Y_* = y_*$ a partir del valor $\mathbf{x}_*$ como

$$y_* = \mathbf{x}_*^T \hat{\boldsymbol{\beta}}$$

- Se puede deinir una noción de error estándar para y_*, e intervalos de confianza

  $\Rightarrow$ debe tener en cuenta la variabilidad en la estimación de $\boldsymbol{\beta}$ y de ϵ_*

LSE como MLE

- Supongasmos que condicionado a $\mathbf{X}_i = \mathbf{x}_i$, los errores ϵ_i son Normales i.i.d.

  $\Rightarrow$ La PDF condicional es $f(\epsilon_i \,|\, \mathbf{x}_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{ -\frac{\epsilon_i^2}{2\sigma^2} \right\}$

- Asumiendo que σ^2 es conocida, la función de verosimilitud (condicional) es

$$\mathcal{L}_n(\boldsymbol{\beta}) = \prod_{i=1}^{n} f(y_i \,|\, \mathbf{x}_i; \boldsymbol{\beta}) \propto \exp\left\{ -\sum_{i=1}^{n} \frac{(y_i - \boldsymbol{\beta}^T \mathbf{x}_i)^2}{2\sigma^2} \right\}$$

  $\Rightarrow$ La log-verosimilitud es $\ell_n(\boldsymbol{\beta}) \propto -\text{RSS}(\boldsymbol{\beta})$

- El MLE $\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{ML}$ maximiza la log-verosimilitud, entonces

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{ML} = \arg\max_{\boldsymbol{\beta}} \ell_n(\boldsymbol{\beta}) = \arg\min_{\boldsymbol{\beta}} \text{RSS}(\boldsymbol{\beta}) = \hat{\boldsymbol{\beta}}_n^{LS}$$

- **Ejercicio:** Bajo el modelo Gaussiano lineal, el LSE es también un MLE

Ridge regression

- LSE penalizado con ℓ_2 se conoce como ridge regression

$$\hat{\beta}^{ridge} = \arg\min_{\beta} \text{RSS}(\beta) + \lambda\|\beta\|_2^2$$

- Para $\lambda > 0$, el estimado "ridge" $\hat{\beta}^{ridge} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X} + \lambda\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$
  - Diferente del LSE $\hat{\beta}^{LS} := \arg\min_{\beta} \text{RSS}(\beta)$
  - Es sesgado y sesgo($\hat{\beta}^{ridge}$) crece con λ
  - Está bien definido incluso si $\mathbf{X}$ no tiene rango completo
- La pérdida de sesgo se gana en potencial de reducir varianza $<$ var $\left[\hat{\beta}^{LS}\right]$
  - Ej: var $\left[\hat{\beta}^{LS}\right]$ es grande cuando $\mathbf{X}$ es cercana a déficit de rango, $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$ inestable
- De la descomposición sesgo-varianza del MSE, compromiso(λ) puede dar

$$\text{MSE}(\hat{\beta}^{ridge}) < \text{MSE}(\hat{\beta}^{LS})$$

LSE penalizado por complejidad

- Ridge es un ejemplo de una clase más grande de LSE penalizado por complejidad

$$\hat{\beta}^J = \arg\min_{\beta} \text{RSS}(\beta) + \lambda J(\beta)$$

  - Función $J(\cdot)$ penaliza (i.e., restringe) los parámetros en β
  - El espacio de parámetros restringido Θ resulta en modelos 'menos complejos'
  - Tuneo de λ balancea bondad de ajuste y complejidad

- Ej: pensalización con norma ℓ_1 resulta en sparsity, i.e., selección de variables