Přednáška V.
Úvod do teorie odhadu

- Pojmy a principy teorie odhadu
- Nestranné odhady
- Metoda maximální věrohodnosti
- Průměr vs. medián

Opakování – výběrová distribuční funkce

- Sestrojíme výběrovou distribuční funkci pro hmotnost lidské postavy, respektive **hmotnost studentů** na přednášce Biostatistiky v matematické biologii (samozřejmě anonymně).

Opakování – střední hodnota

- Uvažujme diskrétní náhodnou veličinu
  - $X = \{x_1, \ldots, x_k\}$
  - $P(X=x_1) = p_1, \ldots, P(X=x_k) = p_k$
- Pak střední hodnota má tvar:

$$E(X) = \mu = \sum_{i=1}^{k} x_i p(x_i)$$

- **Jaká je její interpretace?**

Opakování – pravidlo ±3 sigma

- Co to znamená?
- K čemu to může být dobré?

1. Pojmy a principy teorie odhadu

Jak se vlastně přišlo na použití průměru?

- Použití průměru jako sumarizace *n* pozorovaných hodnot se učí už na základní škole, nicméně zmínka o jeho používání je až z konce 17. století.
- Byl navržen bez ohledu na jakoukoliv souvislost s teorií pravděpodobnosti jako hodnota, označme ji *a*, která má následující vlastnosti:

1. Hodnota *a* minimalizuje reziduální součet čtverců, tedy součet čtverců rozdílů pozorovaných hodnot a hodnoty *a*:

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - a)^2 = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 + n(\bar{x} - a)^2$$

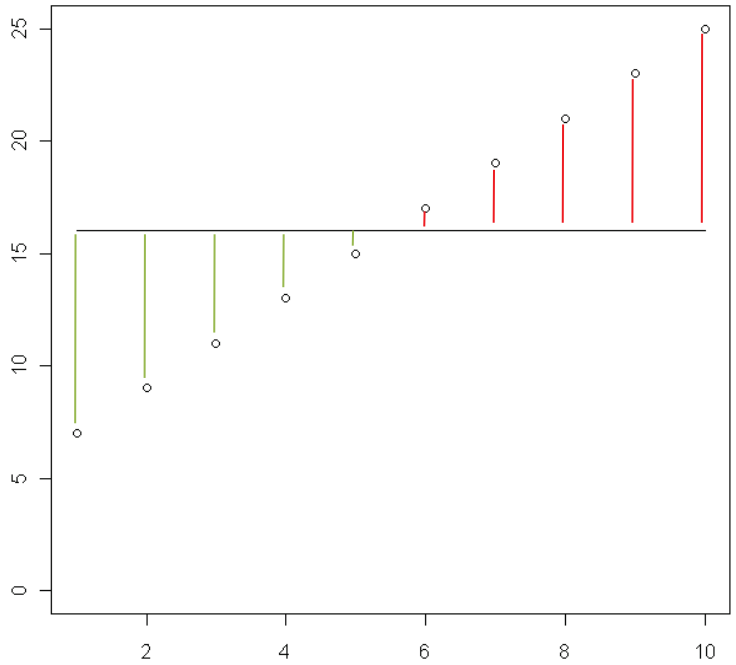
2. Součet reziduí vzhledem k hodnotě *a* je nula, tedy kladná i záporná rezidua jsou v rovnováze:

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - a) = 0$$

- Tyto dvě kritéria zohledňují pouze pozorovaná data, vůbec se nezabývají jakýmkoliv rozdělením pravděpodobnosti a jeho parametry.

Příklad – průměr pozorovaných hodnot

- V případě, že osa *x* nepředstavuje žádnou informaci, je použití průměru v pořádku (kladná i záporná rezidua jsou v rovnováze).



- Co když osa *x* ponese nějakou informaci?

Cíl snažení v teorii odhadu

- Na základě reálných pozorování náhodné veličiny *X* chceme získat informaci o parametrech rozdělení pravděpodobnosti této veličiny.
- Teorie odhadu se snaží sestrojit statistiku, která by na základě pozorovaných dat poskytla nejlepší možný odhad neznámého parametru / parametrů.
- Teorie odhadu předpokládá, že pozorované hodnoty nesou informaci o neznámém parametru.
- Někdy je třeba pozorované hodnoty před použitím statistiky „značně“ upravit → normalizace dat z DNA mikročipů.

Základní pojmy

- **Náhodná veličina** X – číselné ohodnocení výsledku experimentu, zajímá nás její pravděpodobnostní chování – popisuje ho **rozdělení pravděpodobnosti** náhodné veličiny X.
- **Parametr** rozdělení pravděpodobnosti – neznámá hodnota, θ, na které závisí předpis rozdělení pravděpodobnosti
- **Parametrická funkce** – reálná funkce parametru θ.

- **Realizace náhodné veličiny** (n realizací) – představují je pozorované hodnoty: $\boldsymbol{x} = x_1, x_2, \ldots, x_n$. Předpokládám jejich vzájemnou nezávislost.
- **Odhad parametru** θ – reálná funkce $\boldsymbol{x} = d(\boldsymbol{x}) = \hat{\theta}$.
- Odhad parametrické funkce $g(\theta)$ – reálná funkce $\boldsymbol{x} = d(\boldsymbol{x}) = g(\hat{\theta})$.

Klasifikace odhadů

- **Parametrické odhady** – vycházejí z předpokladu znalosti rozdělení pravděpodobnosti, kterým se náhodná veličina řídí. Případně předpokládají i znalost rozdělení pravděpodobnosti sledovaného parametru (tedy náhodné veličiny) – Bayesovské odhady.

- **Neparametrické odhady** – v tomto případě nejsou uvažovány žádné předpoklady o pravděpodobnostním chování dat. Výsledkem jsou robustní odhady se širokým použitím, u kterých ale nelze hodnotit optimálnost vzhledem k pravděpodobnostnímu modelu.

Klíčové otázky v teorii odhadu

- Jak najít bodový odhad?
- Jak hodnotit kvalitu odhadu?

Jak najít bodový odhad?

- Existuje řada postupů k nalezení bodového odhadu neznámého parametru – liší se jak filozofií (např. Bayesovské odhady) tak definicí kritéria optimálních vlastností odhadu. Zaměříme se pouze na vybrané pojmy a postupy.

- **Metoda založená na Rao-Blackwellově větě** – slouží k nalezení nestranného odhadu s nejmenší variabilitou (ne vždy to však lze spočítat).
- **Metoda maximální věrohodnosti** – slouží k nalezení odhadu (hodnoty), který je ve smyslu pozorovaných dat nejvíce pravděpodobný. Respektive lze říci, že při „platnosti“ této hodnoty jsou data nejvíce věrohodná.
- **Bayesovské metody** – nehledají jednu hodnotu parametru, ale celé rozdělení pravděpodobnosti (parametr je zde vlastně náhodná veličina).
- …

Jak hodnotit kvalitu odhadu?

- Vezmeme-li hodnotu $\hat{\theta}$ jako odhad parametru θ, pak lze obecně vyjádřit důsledek tohoto odhadu pomocí tzv. ztrátové funkce („loss function“), která má následující vlastnosti:

$$L(\theta, \hat{\theta}) \geq 0 \quad \text{pro každé } \theta, \hat{\theta}$$

a

$$L(\theta, \theta) = 0 \quad \text{pro každé } \theta$$

- Celkově můžeme kvalitu odhadu vyjádřit pomocí tzv. rizikové funkce („risk function“):

$$R(\theta, \hat{\theta}) = E_\theta(L(\theta, \hat{\theta}(x)))$$

- Logicky chceme najít odhad, který by minimalizoval rizikovou funkci pro všechny hodnoty θ.

Špatná zpráva

- To však není možné – obecně neexistuje odhad, který by minimalizoval rizikovou funkci pro všechny hodnoty θ.

- Vždy jsme totiž schopni najít odhad, který bude mít pro dané θ_0 nulové riziko, ale zároveň bude nepřijatelný pro $\theta \neq \theta_0$.

- **Máme tedy na výběr**:

1. Buď se omezíme pouze na určitou třídu odhadů – to znamená omezíme množinu odhadů nějakou požadovanou vlastností → nestranné odhady.
2. Nebo upravíme přístup k získávání odhadů – více se zaměříme na pozorované hodnoty → metoda maximální věrohodnosti.

2. Nestranné odhady

Střední kvadratická chyba odhadu

- Významnou rizikovou funkcí ve statistice je tzv. **střední kvadratická chyba odhadu** („mean squared error“) definovaná jako

$$MSE(\theta,\hat{\theta}) = E_\theta((\hat{\theta}-\theta)^2)$$

- Výraz pro *MSE*, respektive *MSE* odhadu, se dá rozdělit na dvě komponenty – **vychýlení** (jeho druhou mocninu) a **variabilitu**:

$$MSE(\theta,\hat{\theta}) = E_\theta((\hat{\theta}-\theta+E(\hat{\theta})-E(\hat{\theta}))^2) = (\theta-E(\hat{\theta}))^2 - E((\hat{\theta}-E(\hat{\theta}))^2)$$

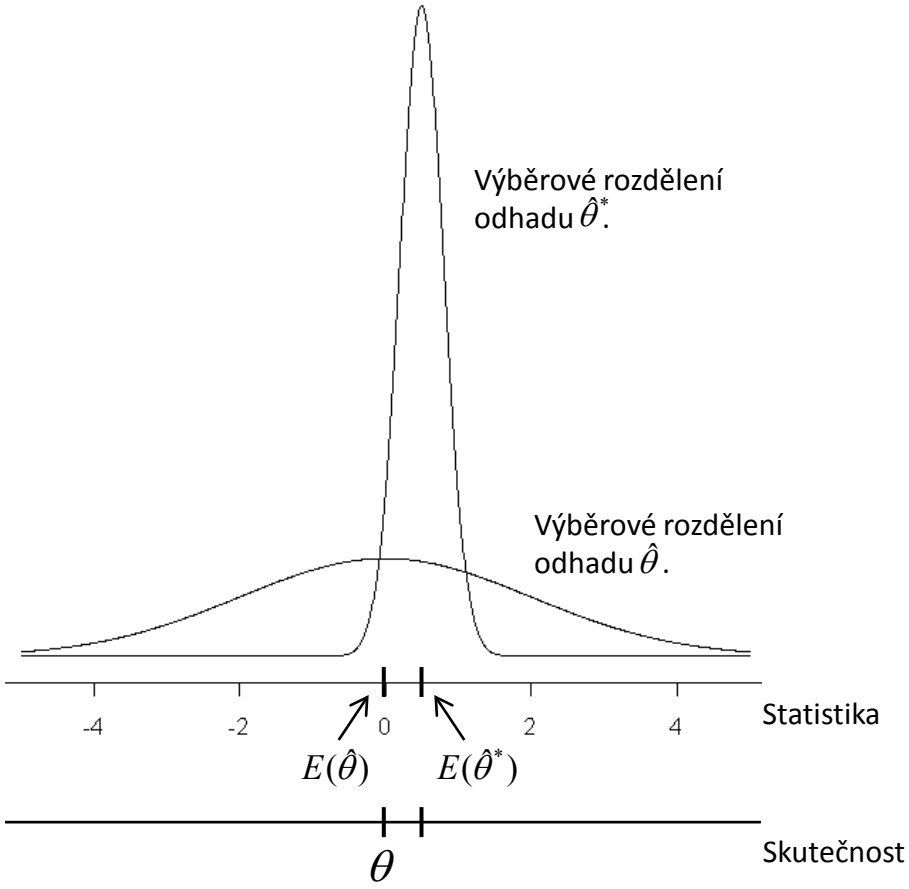
$$MSE(\theta,\hat{\theta}) = \text{bias}^2(\hat{\theta}) + \text{var}(\hat{\theta})$$

vychýlení^2 + variabilita

„bias^2“ + „precision“

Příklad

- Máme dva odhady neznámého parametru θ.
- Jeden je vychýlený s malou variabilitou.
- Druhý je nevychýlený s větší variabilitou.
- Ne vždy musí být lepším odhadem ten, který je nevychýlený!



Nestrannost

- Celkem **logickým omezením odhadů**, které nás zajímají, **je jejich nestrannost**.
- Odhad *d*(***x***) parametru θ je nestranný když

$$E_\theta(d(X)) = \theta \quad \text{pro každé } \theta \in \Theta$$

- Platí tedy:

$$E_\theta(d(X) - \theta) = 0 \quad \text{pro každé } \theta \in \Theta$$

- V množině nestranných odhadů se poté **snažíme najít odhad s nejmenší variabilitou** – abychom měli i minimální *MSE*.

- V úvodní přednášce jsme mluvili o zkreslení výsledků („biased results“) – nestrannost je ve své podstatě to samé.

Průměr – nestranný odhad?

- Normální rozdělení pravděpodobnosti:

$$X_i \sim N(\mu, \sigma^2)$$
$$E(\overline{X}) = E(\tfrac{1}{n}\sum X_i) = \tfrac{1}{n}\sum EX_i = \mu \text{ pro každé } \mu \in R$$

- Poissonovo rozdělení pravděpodobnosti:

$$X_i \sim Po(\lambda)$$
$$E(\overline{X}) = E(\tfrac{1}{n}\sum X_i) = \tfrac{1}{n}\sum EX_i = \lambda \text{ pro každé } \lambda \in R$$

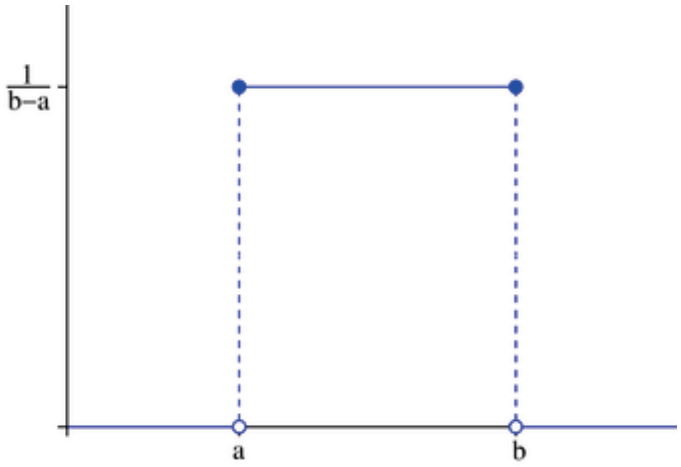
- Použití průměru pro tato rozdělení má smysl, ale je třeba si ověřit dané rozdělení pravděpodobnosti.

Nestranný odhad – příklad

- Měříme čas, který trvá lékaři určitá činnost (např. ambulantní ošetření). Chceme najít odhad maxima tohoto času, tedy jak maximálně dlouho mu daná činnost může trvat.

- Uvažujme rovnoměrně spojité rozdělení pravděpodobnosti na intervalu [0,θ]:

$$X \sim Rs(0,\theta)$$
$$\rightarrow f(x) = 1/\theta \quad \text{pro každé } x \in (0,\theta)$$
$$\rightarrow f(x) = 0 \quad \text{pro každé } x \notin (0,\theta)$$



- Jak můžeme hodnotu θ odhadnout?

Nestranný odhad – příklad

- Máme tedy náhodný výběr $X_1, X_2,\ldots,X_n$ i.i.d. z rozdělení $Rs[0,\theta]$, které ještě seřadíme podle velikosti: $X_{(1)}, X_{(2)},\ldots,X_{(n)}$.

$$E(X_i) = \theta \qquad D(X_i) = \tfrac{1}{12}\theta^2$$

- Máme dvě zajímavé hodnoty:

$$\overline{X} = \tfrac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

$$X_{(n)} = \max X_i$$

- Uvažujeme dva odhady:

$$T_1 = 2\overline{X} = \tfrac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$$

$$T_2 = \tfrac{n+1}{n} X_{(n)} = \tfrac{n+1}{n} \max X_i$$

Který je lepší?

Nestranný odhad – příklad

- Máme tedy $X_1, X_2,\ldots,X_n$, které seřadíme podle velikosti: $X_{(1)}, X_{(2)},\ldots,X_{(n)}$.
- Máme dvě zajímavé hodnoty:

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad E\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} EX_i = \theta/2 \qquad D(\overline{X}) = \frac{1}{12n}\theta^2$$

$$X_{(n)} = \max X_i \qquad EX_{(n)} = E(\max X_i) = \frac{n}{n+1}\theta \qquad D(X_{(n)}) = \frac{n\theta^2}{(n+1)^2(n+2)}$$

- Uvažujeme dva odhady:

$$T_1 = 2\overline{X} = \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad ET_1 = E(2\overline{X}) = 2(\frac{\theta}{2}) = \theta \qquad D(T_1) = \frac{1}{3n}\theta^2$$

$$T_2 = \frac{n+1}{n} X_{(n)} = \frac{n+1}{n}\max X_i \qquad ET_2 = E(\frac{n+1}{n} X_{(n)}) = \frac{n+1}{n}\frac{n}{n+1}\theta = \theta \qquad D(T_2) = \frac{\theta^2}{n(n+2)}$$

Který je lepší?

Nestranný odhad – příklad

- Máme tedy $X_1, X_2,\ldots,X_n$, které seřadíme podle velikosti: $X_{(1)}, X_{(2)},\ldots,X_{(n)}$.
- Máme dvě zajímavé hodnoty:

$$\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad E\overline{X} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} EX_i = \theta/2 \qquad D(\overline{X}) = \frac{1}{12n}\theta^2$$

$$X_{(n)} = \max X_i \qquad EX_{(n)} = E(\max X_i) = \frac{n}{n+1}\theta \qquad D(X_{(n)}) = \frac{n\theta^2}{(n+1)^2(n+2)}$$

- Uvažujeme dva odhady:

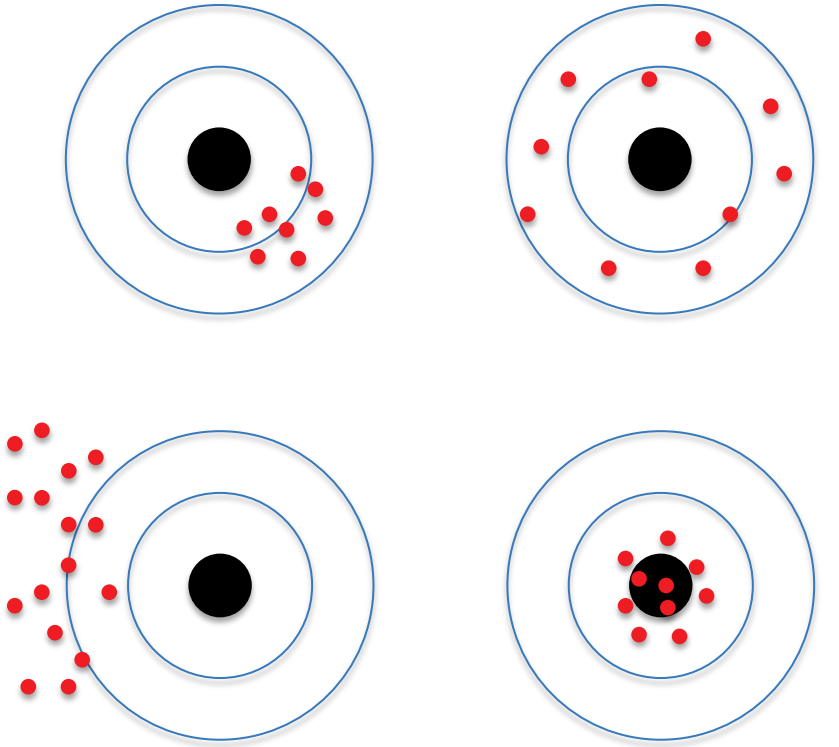
$$T_1 = 2\overline{X} = \frac{2}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i \qquad ET_1 = E(2\overline{X}) = 2(\tfrac{\theta}{2}) = \theta \qquad D(T_1) = \frac{1}{3n}\theta^2$$

$$T_2 = \frac{n+1}{n}X_{(n)} = \frac{n+1}{n}\max X_i \qquad ET_2 = E(\tfrac{n+1}{n}X_{(n)}) = \frac{n+1}{n}\frac{n}{n+1}\theta = \theta \qquad D(T_2) = \frac{\theta^2}{n(n+2)}$$

Vítězem se stal odhad T_2, jeho variabilita s rostoucím *n* rychleji klesá k 0.

Vztah vychýlení a variability odhadu

- Odhady můžeme kombinací vychýlení a variability rozdělit (hypoteticky) do čtyř skupin.
- Význam není až tak v jednoduchých sumarizacích dat, ale spíš ve stochastickém modelování.



Skutečná hodnota neznámého parametru

Odhad neznámého parametru

Poznámka o stochastickém modelování

- Modely, které jsou příliš jednoduché (mají málo vysvětlujících proměnných) mohou být nepřesné kvůli velkému vychýlení, protože nejsou dostatečně flexibilní vzhledem k pozorovaným datům.

- Modely, které jsou příliš složité (mají mnoho vysvětlujících proměnných) mohou být nepřesné kvůli velké variabilitě, protože se příliš přizpůsobují pozorovaným datům (tzv. „overfitting“).

- Tomuto fenoménu se říká „**bias-variance tradeoff**“.

- Identifikovat správný model není jednoduché, je třeba najít správný počet vysvětlujících proměnných („model complexity“).

3. Metoda maximální věrohodnosti

Metoda maximální věrohodnosti

- Autorem je R. A. Fisher (1922). Anglicky „maximum likelihood estimation“.
- Máme *n* nezávislých stejně rozdělených pozorování (i.i.d.) z rozdělení s hustotou $f(x;\theta)$.
- **Sdružená hustota** odpovídající *n* pozorovaným hodnotám $x_1, x_2, \ldots, x_n$ je:

Jaká? A proč?

Metoda maximální věrohodnosti

- Autorem je R. A. Fisher (1922). Anglicky „maximum likelihood estimation“.
- Máme *n* nezávislých stejně rozdělených pozorování (i.i.d.) z rozdělení s hustotou $f(x;\theta)$.
- **Sdružená hustota** odpovídající *n* pozorovaným hodnotám x_1, x_2,…, x_n je:

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

- Sdružená hustota vyjadřuje(za předpokladu, že známe θ), jak moc je pravděpodobné, že pozorované hodnoty pochází z rozdělení s hustotou $f(x;\theta)$
- **Pointa metody maximální věrohodnosti**: Dívat se na sdruženou hustotu jako na funkci θ a vybrat θ takové, aby výraz $f(x_1,\ldots,x_n \mid \theta) = \prod_{i=1}^{n} f(x_i;\theta)$ byl co největší (maximum).

Věrohodnostní funkce

- Zavádíme tzv. **věrohodnostní funkci** („likelihood function“):

$$L(\theta \mid x_1, \ldots, x_n) = f(x_1, \ldots, x_n \mid \theta)$$

- Maximálně věrohodný odhad, značíme ho $\hat{\theta}_{MLE}$, je číslo, které maximalizuje věrohodnostní funkci, tedy

$$\hat{\theta}_{MLE} = \arg\max_{\theta \in \Theta} L(\theta \mid x_1, \ldots, x_n)$$

- Výpočetně se jedná o řešení rovnice (rovnic):

$$dL(\theta \mid x_1, \ldots, x_n) / d\theta = 0$$

- Musíme si ještě ověřit, že se jedná o maximum – např. pomocí druhých derivací.

Logaritmus věrohodnostní funkce

- Často je výhodnější (hlavně výpočetně jednodušší) maximalizovat logaritmus věrohodnostní funkce:

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

- Bude maximum pro věrohodnostní funkci i logaritmus věrohodnostní funkce stejné? Pokud ano, tak proč?

ML odhad parametru λ Poissonova rozdělení

- Máme *n* i.i.d. pozorování z Poissonova rozdělení: x_1, x_2,…, x_n.
- Sdružená hustota má tvar:

$$f(x_1,\ldots,x_n \mid \lambda) = \prod_{i=1}^{n} \frac{e^{-\lambda}\lambda^{x_i}}{x_i!}$$

- Věrohodnostní funkce má tvar:

$$L(\lambda \mid x_1,\ldots,x_n) = f(x_1,\ldots,x_n \mid \lambda) = e^{-n\lambda}\lambda^{\Sigma_i x_i} \,/\, \prod_i x_i!$$

- Logaritmus věrohodnostní funkce má tvar:

$$\ln L(\lambda \mid x_1,\ldots,x_n) = \sum_i x_i \ln\lambda - n\lambda - \ln(\prod_i x_i!)$$

- Jak vypadá $\hat{\theta}_{MLE}$?

ML odhad parametru λ Poissonova rozdělení

- Derivace logaritmu věrohodnostní funkce má tvar:

$$\frac{d \ln L}{d\lambda} = \sum_i x_i / \lambda - n = 0$$

- Výsledkem je průměr:

$$\hat{\lambda} = \frac{\sum_i x_i}{n}$$

- Je to maximum?

$$\frac{d^2 \ln L}{d\lambda^2} = -\sum_i x_i / \lambda^2 < 0$$

ML odhad parametru μ normálního rozdělení

- Máme *n* i.i.d. pozorování z normálního rozdělení: $x_1, x_2, \ldots, x_n$.
- Sdružená hustota má tvar:

$$f(x_1,\ldots,x_n \mid \mu,\sigma^2) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-(x_i-\mu)^2/2\sigma^2}$$

- Logaritmus věrohodnostní funkce má tvar:

$$\ln L(\lambda \mid x_1,\ldots,x_n) = -\frac{n}{2}\ln 2\pi - \frac{n}{2}\ln\sigma^2 - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2$$

- Parciální derivace logaritmu věrohodnostní funkce mají tvar:

$$\partial \ln L / \partial\mu = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu) = 0$$

$$\partial \ln L / \partial\sigma^2 = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4}\sum_{i=1}^{n}(x_i-\mu)^2 = 0$$

ML odhad parametru μ normálního rozdělení

- Výsledkem jsou následující odhady:

$$\hat{\mu}_{MLE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{x}$$

$$\hat{\sigma}^2_{MLE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2$$

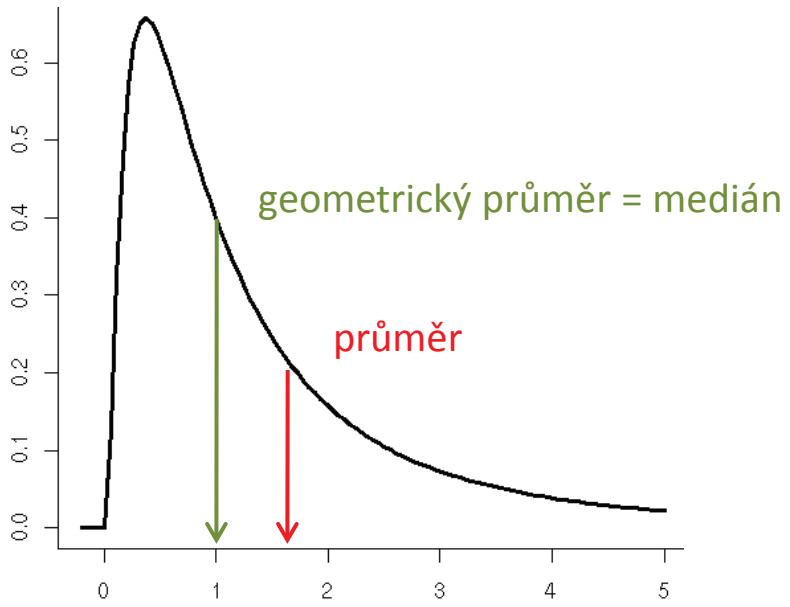
4. Srovnání průměru a mediánu

Nesmyslné použití průměru u asymetrických dat

- Chceme-li charakterizovat log-normální rozdělení z hlediska střední hodnoty, je použití průměru nesmyslné. Není totiž splněn model, pro který byl jako optimální odhad odvozen!

- Vhodnějším odhadem je **medián** a **geometrický průměr** (jsou teoreticky ekvivalentní pro log-normální data)
- Geometrický průměr je průměr spočítaný na normálních datech, tedy po transformaci $y = \ln(x)$.

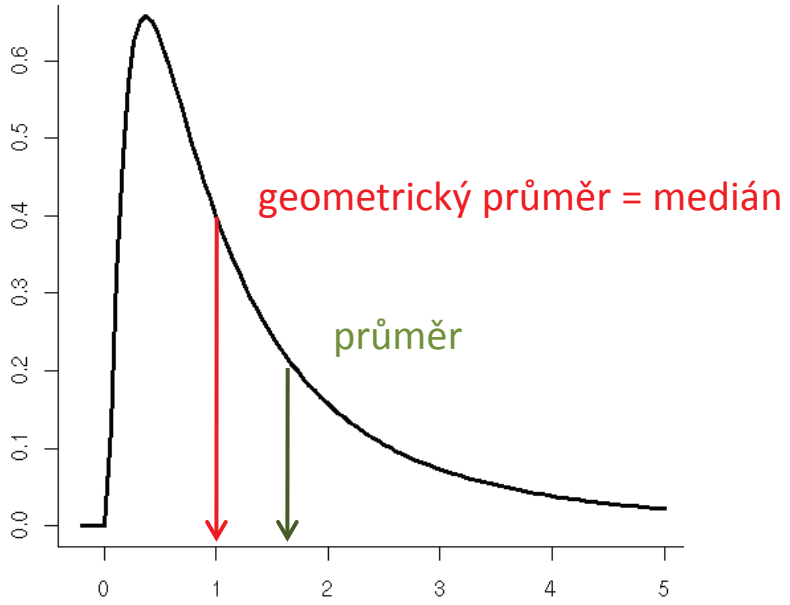
- **Příklad**: počty bílých krvinek.



Smysluplné použití průměru u asymetrických dat

- Chceme-li charakterizovat log-normální rozdělení z hlediska celkového součtu pozorovaných hodnot, je použití průměru smysluplné. Jedná-li se totiž např. o spotřebu nějakého materiálu, alkoholu nebo peněz, průměr popisuje z hlediska celkového součtu spotřebu lépe.

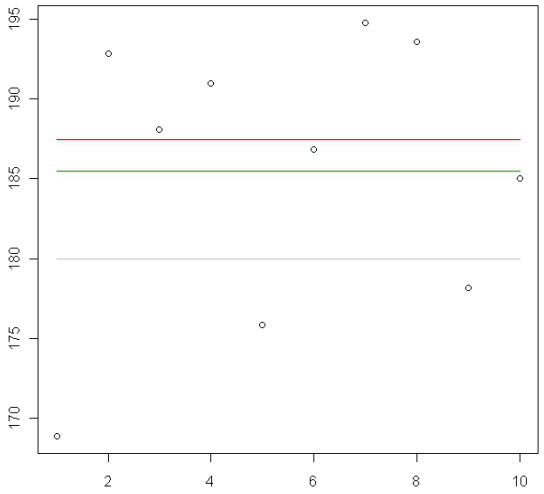
- **Příklad**: plánování celkové spotřeby nějakého materiálu, alkoholu nebo peněz do budoucna.



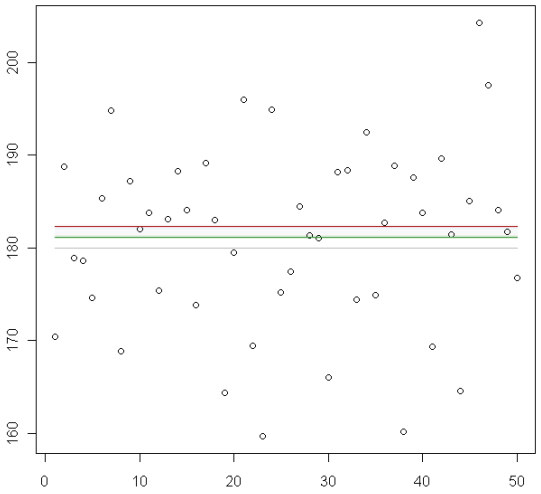
Smysluplné použití průměru u symetrických dat

- Pokud je splněn pravděpodobnostní model, tedy zejména normalita dat, je použití průměru na místě.
- **Průměr je konzistentní odhad** – pro $n \to \infty$ konverguje k θ podle pravděpodobnosti. Pro rostoucí n máme zaručeno, že se průměr přibližuje k θ.

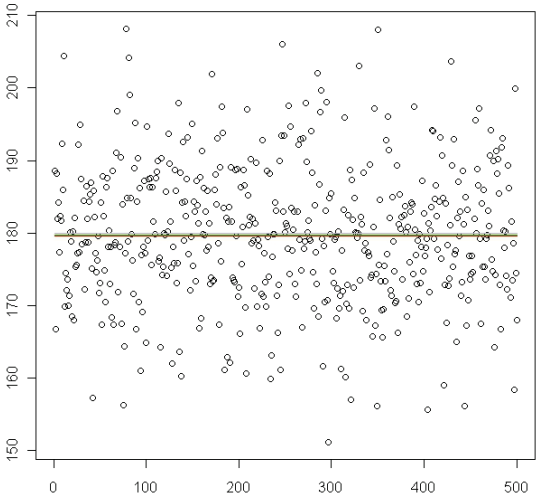
$n = 10$



$n = 50$



$n = 500$



skutečná hodnota průměr medián

Shrnutí – průměr vs. medián

	Výhody	Nevýhody
Průměr	Využívá informace celého souboru dat	Citlivý na odlehlá pozorování
	Jednoduché rozdělení pravděpodobnosti	Omezené použití u asymetrických dat
Medián	Není citlivý na odlehlá pozorování	Využívá informaci pouze jednoho pozorování
	Použití pro všechny typy dat	Komplikované rozdělení pravděpodobnosti

Shrnutí

- Používejte průměr!
- Ale vždy si ověřte předpoklad normality (nebo alespoň symetrie), případně Poissonova rozdělení dat! A taky se nezapomeňte podívat na odlehlé hodnoty!
- Pokud si něčím nejste jistí, použijte i medián.

- **Useknutý průměr** – odhad, který je svými vlastnostmi mezi průměrem a mediánem, spočítáme ho tak, že „odsekneme“ *m* nebo *m* % minimálních a maximálních hodnot a ze zbytku spočítáme průměr.

Poděkování…

Rozvoj studijního oboru „Matematická biologie“ PřF MU Brno je finančně podporován prostředky projektu ESF č. CZ.1.07/2.2.00/07.0318 „Víceoborová inovace studia Matematické biologie“ a státním rozpočtem České republiky