Tema 3. Estimación de la función de densidad Parte 2

Rosa M. Crujeiras
Alberto Rodríguez

Dpto. de Estadística e Investigación Operativa
Máster en Técnicas Estadísticas
Curso 2009-2010

Ejercicio. Para el estimador Naive que has programado, vamos a programar una aproximación del MISE de la siguiente forma:

$$MISE(h) = \mathbb{E}\int(\hat{f}_{n,N}(x) - f(x))^2dx$$

- Consideramos una secuencia de ventanas H entre 0'2 y 1, con paso 0'05.
- Generamos una muestra de una $N(0,1)$ de tamaño $n = 100$ para construir el Naive.
- Evaluamos el Naive, para cada $H[i]$ (y la densidad Normal) en una secuencia de puntos x entre -3 y 3, con espaciado 0'01.
- Aproximamos $\int(\hat{f}_{n,N}(x) - f(x))^2dx$ como suma de las diferencias al cuadrado.
- Repetimos el procedimiento anterior para $M = 100$ muestras.
- Para cada $H[i]$ promediamos el MISE en las M muestras.
- Representamos $MISE(h) \sim h$. ¿Dónde se encuentra el

El estimador Naive viene dado por la expresión

$$\hat{f}_{n,N}(x) = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbb{I}(x - h < X_i < x + h)}{2nh},$$

que se puede reescribir como

$$\hat{f}_{n,N}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \mathbb{I}(x - h < X_i < x + h) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^{n} \omega \left(\frac{x - X_i}{h} \right)$$

donde, ω es la densidad de la distribución uniforme en $(-1, 1)$.

Por tanto la aportación de cada observación X_i al Estimador Naive en el punto x viene determinado por el valor de

$$\omega\left(\frac{x - X_i}{h}\right),$$

que vale $1/2$ para todos los puntos en $(x - h, x + h)$ independientemente de su proximidad a x.

Si se reemplaza ω por una densidad K (denominada núcleo) con una única moda en cero y simétrica se obtiene el estimador tipo núcleo

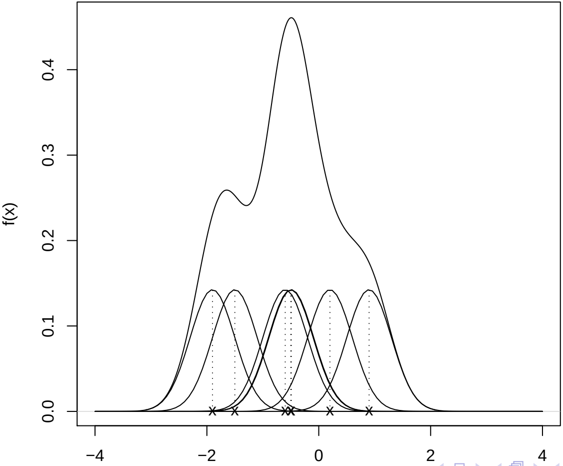
$$\hat{f}_{n,K}(x) = \frac{1}{nh} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} K_h(x - X_i),$$

donde

$$K_h(u) = \frac{1}{h} K\left(\frac{u}{h}\right)$$

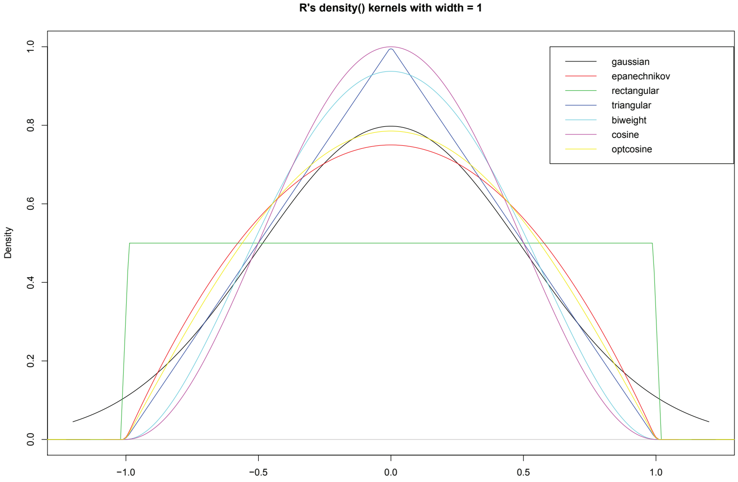
es la densidad de hX_K siendo X_K una variable con función de densidad K.

¿Cómo se interpreta el estimador tipo núcleo?

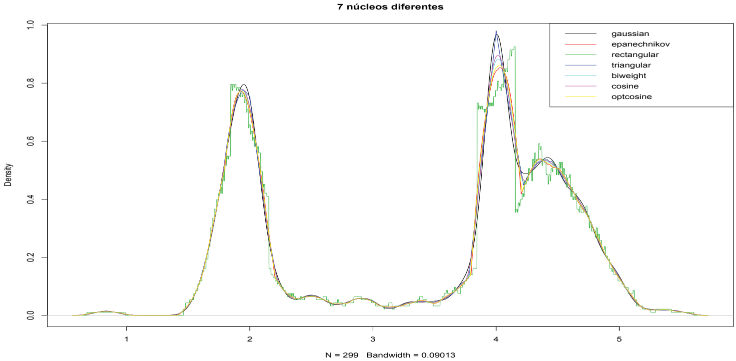


A continuación se muestran algunos núcleos utilizados en la práctica:

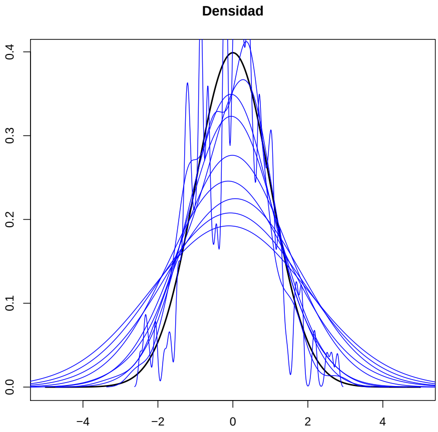
- Uniforme: $1/2\mathbb{I}(|x| < 1)$.
- Triangular: $(1 - |x|)\mathbb{I}(|x| < 1)$.
- Epanechnikov: $3/4(1 - x^2)\mathbb{I}(|x| < 1)$.
- Biweight: $15/16(1 - x^2)^2\mathbb{I}(|x| < 1)$.
- Triweight: $35/32(1 - x^2)^3\mathbb{I}(|x| < 1)$.
- Gaussiano: $(2\pi)^{-1/2}\exp(-x^2/2)$.


R's density() kernels with width = 1
Density
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
gaussian
epanechnikov
rectangular
triangular
biweight
cosine
optcosine

El estimador tipo núcleo hereda las propiedades de suavidad del núcleo. Sin embargo la forma del núcleo no tiene un papel tan determinante como la ventana h.



Efecto de la ventana en la estimación de una densidad $N(0,1)$, con el estimador tipo núcleo:



Para evaluar $\hat{f}_{n,K}(x)$ como estimador de $f(x)$, utilizamos el Error Cuadrático Medio:

$$MSE(x) = \mathbb{E}(\hat{f}_{n,K}(x) - f(x))^2$$

que sabemos se puede descomponer en sesgo al cuadrado y varianza:

$$MSE(x) = \left(\mathbb{E}(\hat{f}_{n,K}(x)) - f(x)\right)^2 + \mathsf{Var}(\hat{f}_{n,K}(x)).$$

Al igual que derivamos las expresiones del sesgo y la varianza del Naive, podemos hacer lo mismo con las del estimador tipo núcleo, obteniendo:

- Para el sesgo:

$$\mathbb{E}(\hat{f}_{n,K}(x)) = \int K(u)f(x - hu)du$$

Bajo condiciones de regularidad sobre f (Wand y Jones, 1995) podemos obtener la siguiente aproximación:

$$f(x - hu) = f(x) - huf'(x) + \frac{1}{2}(hu)^2 f''(x) + o(h^2)$$

Si suponemos que $\mu_2(K) = \int u^2 K(u)du < \infty$, entonces:

$$\mathbb{E}(\hat{f}_{n,K}(x)) = f(x) + \frac{1}{2}h^2\mu_2(K)f''(x) + o(h^2)$$

donde hemos utilizado que K es una densidad simétrica, y por tanto:

$$\int K(u)du = 1, \quad \int uK(u)du = 0.$$

¿Qué relación tiene con el sesgo del Naive que obtuvimos antes?

Para la varianza tenemos:

$$\begin{aligned}
\mathsf{Var}(\hat{f}_{n,K}(x)) &= \frac{1}{n}\mathsf{Var}\left(K_h(x - X_1)\right) \\
&= \frac{1}{n}\left[\mathbb{E}(K_h^2(x - X_1)) - \mathbb{E}^2(K_h(x - X_1))\right] \\
&= \frac{1}{n}\left[\int K_h^2(x-y)f(y)dy - \left(\int K_h(x-y)f(y)dy\right)^2\right] \\
&= \frac{1}{nh}\int K^2(u)f(x-hu)du - \frac{1}{n}\left(\int K(u)f(x-hu)du\right)^2 \\
&= \frac{1}{nh}\int K^2(u)\left(f(x)+o(1)\right)du - \frac{1}{n}(f(x)+o(1))^2 \\
&= \frac{1}{nh}R(K)f(x) + o((nh)^{-1})
\end{aligned}$$

Utilizando las expresiones anteriores del sesgo y la varianza tenemos:

$$MSE(x) = \frac{1}{nh} R(K) f(x) + \frac{1}{4} h^4 \mu_2(K)^2 \left(f''(x) \right)^2 + o((nh)^{-1} + h^4).$$

El AMSE en un punto x viene dado por:

$$AMSE(x) = \frac{1}{nh} R(K) f(x) + \frac{1}{4} h^4 \mu_2(K)^2 \left(f''(x) \right)^2$$

Integrando el MSE en x tenemos:

$$MISE(h) = \frac{1}{nh}R(K) + \frac{1}{4}h^2\mu_2(K)^2R(f'') + o((nh)^{-1} + h^4)$$

y la versión asintótica:

$$AMISE(h) = \frac{1}{nh}R(K) + \frac{1}{4}h^2\mu_2(K)^2R(f'')$$

Ejercicio (Estimador Kernel)

Prueba que el valor que minimiza el $AMISE$ es:

$$h_{AMISE} = \left(\frac{R(K)}{n\mu_2(K)^2 R(f'')} \right)^{1/5}$$

y por tanto:

$$\inf_{h>0} AMISE(h) = \frac{5}{4} \left(\mu_2(K)^2 R^4(K) R(f'') \right)^{1/5} n^{-4/5}$$

El AMISE del Histograma (Wand y Jones, 1995, p.23) viene dado por:

$$AMISE_H(h) = \frac{1}{nh} + \frac{1}{12} R(f')$$

y el menor error que podemos cometer en muestras grandes, utilizando el Histograma es:

$$\inf_{h>0} AMISE_H(h) = \frac{1}{4}(36R(f'))^{1/3} n^{-2/3}.$$

¿Es mejor o peor que el estimador núcleo?

Ejercicio (Estimador Kernel) Prueba que si f es $N(\mu, \sigma^2)$, entonces:

$$h_{AMISE} = \left(\frac{8\sqrt{\pi} R(K)}{3\mu_2(K)^2 n} \right)^{1/5} \sigma$$

Ejercicio (Estimador Kernel) En el caso anterior, prueba que si K es la densidad de la $N(0,1)$ entonces:

$$h_{AMISE} = \left(\frac{4}{3n} \right)^{1/5} \sigma$$

Ejercicio (Estimador Kernel) Calcula h_{AMISE} con f densidad de una $N(\mu, \sigma^2)$ y K el núcleo de Epanechnikov.

Ejercicio.

a) Carga los datos del Geyser de la librería `MASS`. Utiliza la función `hist` para los datos de espera entre erupciones.

b) Aplica el estimador Naive sobre estos datos.

c) Programa el estimador Núcleo (`kerdens`) y los núcleos Uniforme y Epanechnikov (`kerfun`). Aplica ambas estimaciones sobre los datos de espera y comprueba que el resultado con el núcleo Uniforme es el Naive.

Ventana Normal

Si f es una densidad Normal con desviación típica σ, entonces:

$$h_{AMISE} = \left(\frac{8\sqrt{\pi} R(K)}{3\mu_2(K)^2 n} \right)^{1/5} \sigma$$

La ventana Normal se obtiene reemplazando σ por una estimación $\hat{\sigma}$:

$$\hat{h}_{NS} = \left(\frac{8\sqrt{\pi} R(K)}{3\mu_2(K)^2 n} \right)^{1/5} \hat{\sigma}$$

Por ejemplo $\hat{\sigma} = S$, cuasi-desviación típica.

Se puede utilizar un estimador más robusto de la desviación, que viene dado por el rango intercuartílico estandarizado:

$$\hat{\sigma}_{IQR} = \frac{IQR}{\Phi^{-1}(0'75) - \Phi^{-1}(0'25)},$$

donde Φ^{-1} es la función cuantil de la $N(0,1)$. Para reducir el riesgo de sobresuavizar, Silverman (1986, p.47) recomienda utilizar el mínimo entre $\hat{\sigma}_{IQR}$ y S.

Validación cruzada

El Error Cuadrático Integrado (ISE) se define como:

$$ISE(h) = \int \left(\hat{f}_{n,K}(x) - f(x) \right)^2 dx$$

que se puede escribir como:

$$ISE(h) = \int \hat{f}^2_{n,K}(x)dx - 2\int \hat{f}_{n,K}(x)f(x)dx + \int f^2(x)dx$$

Podemos buscar la ventana que haga el ISE lo más pequeño posible.

A partir de la expresión anterior, bastará con minimizar:

$$CV(h) = \int \hat{f}_{n,K}^2(x)dx - 2\int \hat{f}_{n,K}(x)f(x)dx$$

El primer término de CV es fácil de calcular a partir de la muestra:

$$\int \hat{f}_{n,K}^2(x)dx = \frac{1}{n^2h}\sum_{i,j} K*K\left(\frac{X_i - X_j}{h}\right),$$

donde

$$K*K(x) = \int K(y)K(x-y)dy$$

es la convolución de K con K.

El segundo término no se puede calcular directamente a partir de la muestra, pero podemos estimarlo:

$$2\int \hat{f}_{n,K}(x)f(x)dx = 2\mathbb{E}\left(\hat{f}_{n,K}(X)\right)$$

donde X es una v.a. con densidad f. Entonces, si tuviésemos una m.a.s. $Y_1,\ldots,Y_n$ de X (independiente de la muestra de los $X_1,\ldots,X_n$) podríamos construir el estimador:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\hat{f}_{n,K}(Y_i)$$

El procedimiento anterior lo podemos *imitar* construyendo para cada X_i el estimador del segundo término utilizando toda la muestra excepto esa observación:

$$\hat{f}_{n,K}^{-i}(X_i) = \frac{1}{n-1} \sum_{j \neq i} K_h(X_i - X_j)$$

Entonces:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \hat{f}_{n,K}^{-i}(X_i) = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j>i} K_h(X_i - X_j)$$

será un estimador de $\int \hat{f}_{n,K}(x) f(x) dx$.

Por tanto, la función CV se puede estimar mediante:

$$CV(h) = \frac{1}{n^2 h} \sum_{i,j} K*K\left(\frac{X_i - X_j}{h}\right) - \frac{4}{n(n-1)} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j>i} K_h(X_i - X_j)$$

El método de validación cruzada selecciona como parámetro de suavizado el valor h_{CV} que minimiza CV.

En lugar de utilizar la fórmula del MISE se considera su expresión asintótica:

$$AMISE(h) = \frac{1}{nh}R(K) + \frac{1}{4}h^4\mu_2(K)^2R(f^{''})$$

donde la función objetivo a minimizar (BCV) se obtiene substituyendo $R(f^{''})$ por el estimador:

$$\hat{R}(f^{''}) = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j\neq i}\left(K_h^{''} * K_h^{''}\right)(X_i - X_j)$$

Recordemos que estamos trabajando con la suposición de que $R(f^{''}) < \infty$. Bajo condiciones de regularidad sobre f, y aplicando integración por partes, se puede demostrar que:

$$\int (f^{''}(x))^2 dx = \int f^{4)}(x) f(x) dx = \psi_4$$

donde $\psi_4 = \mathbb{E}(f^{r)}(X))$.

Jones y Seather (1991) propusieron estimar ψ_r como:

$$\hat{\psi}_r(g) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f_{n,L,g}^{r)}(X_i) = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} L_g^{r)}(X_i - X_j)$$

donde L es una función núcleo y g es una ventana, no necesariamente iguales a K y h (aunque se suele tomar $L = K$). Pero tenemos que seleccionar g...

Para seleccionar g, buscamos el que minimiza el $AMSE(0)$ (Wand y Jones, 1995):

$$g_{AMSE} = \left(-\frac{2K^{r)}(0)}{\mu_2(K) n \psi_{r+2}} \right)^{1/(r+3)}$$

Volviendo al problema inicial, recordemos que:

$$h_{AMISE} = \left(\frac{R(K)}{\mu_2(K)^2 n \psi_4} \right)^{1/5}.$$

Si reemplazamos ψ_4 por su estimador, utilizando la ventana óptima g_{AMSE} tendríamos:

$$\hat{h}_{PI} = \left(\frac{R(K)}{\mu_2(K)^2 n \hat{\psi}_4(g_{AMSE})} \right)^{1/5},$$

donde:

$$g_{AMSE} = \left(-\frac{2K^{4)}(0)}{\mu_2(K) n \psi_6} \right)^{1/7}.$$

Pero esto vuelve a depender de ψ_6, y si hacemos lo mismo, volvemos a tener ψ_8...

Normalmente, se para después de varias etapas (dos etapas). En la última etapa, se reemplaza el valor de ψ_r por lo que valdría para la densidad Normal. En el caso de una Normal con desviación σ, para r par se tiene:

$$\psi_r = \frac{(-1)^{r/2} r!}{(2\sigma)^{r+1}(r/2)!\sqrt{\pi}}.$$

Ejercicio. Detalla el método de Seather-Jones en dos etapas, para la selección de ventana.

También se puede utilizar el Bootstrap para seleccionar la ventana. La versión Boostrap del MISE es:

$$MISE^*(h) = \mathbb{E}^* \int \left(\hat{f}^*_{n,K}(x,h) - \hat{f}_{n,K}(x,g) \right)^2 dx.$$

En esta expresión tenemos dos ventanas: g, la ventana que se utiliza para la estimación Núcleo inicial y h, la ventana Bootstrap. La generación de la muestra Bootstrap $X_1^*, \ldots, X_n^*$ puede realizarse de distintas maneras.

Estimador Núcleo local

$$\hat{f}_{n,K}(x) = \frac{1}{nh(x)} \sum_{i=1}^{n} K\left(\frac{x - X_i}{h(x)}\right)$$

- La ventana depende de cada punto x.
- El estimador local no tiene porqué ser una densidad.
- El AMSE es del mismo orden que para el estimador Núcleo ($o(n^{-4/5})$).

Estimador Núcleo variable

$$\hat{f}_{n,K}(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\alpha(X_i)} K\left(\frac{x - X_i}{\alpha(X_i)}\right)$$

- Si K es densidad, el estimador Núcleo variable también lo es.
- Una buena elección es $\alpha(X_i) = hf^{-1/2}(X_i)$, que proporciona un sesgo de orden h^4.

Sea $\mathbb{X}$ un vector aleatorio d-dimensional y $\mathcal{X} = (\mathbb{X}_1, \ldots, \mathbb{X}_n)$ una m.a.s. El estimador Núcleo se puede generalizar al caso multidimensional como:

$$\hat{f}_{n,K,H}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n|H|^{1/2}} \sum_{i=1}^{n} K(H^{-1/2}(\mathbf{x} - \mathbb{X}_i)), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$$

donde H es una matriz de ventanas (simétrica y definida positiva) y K una densidad d-dimensional. Si denotamos por $K_H(\mathbf{u}) = |H|^{-1/2} K(H^{1/2}\mathbf{u})$ podemos escribir:

$$\hat{f}_{n,K,H}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} K_H(\mathbf{x} - \mathbb{X}_i).$$

- ¿Cómo se define el núcleo?
- ¿Cómo puede ser la matriz ventana? ¿Qué condiciones debe cumplir?
- ¿Sesgo y varianza?

Un ejemplo:

Sea f una densidad sobre $[0,1]$ y consideremos la serie φ_ν:

$$\begin{aligned}\varphi_0(x) &= 1\\ \varphi_{2r}(x) &= \sqrt{2}\cos(2\pi r x)\\ \varphi_{2r-1}(x) &= \sqrt{2}\sin(2\pi r x)\end{aligned}$$

Podemos representar f como:

$$f(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} f_\nu \varphi_\nu(x), \quad f_\nu = \int_0^1 f(x)\varphi_\nu(x)dx$$

Cada uno de los coeficientes puede escribirse como:

$$f_\nu = \mathbb{E}(\varphi_\nu(X)), \quad X \sim f$$

por lo que podemos estimarlos como:

$$\hat{f}_\nu = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \varphi_\nu(X_i)$$

y podemos construir:

$$\hat{f}(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \hat{f}_\nu \varphi_\nu(x)$$

pero debemos truncar la serie en algún sumando l.

Una aproximación más general consiste en introducir una secuencia de pesos λ_ν tal que $\lambda_\nu \to 0$ cuando $\nu \to \infty$:

$$\hat{f}(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \lambda_\nu \hat{f}_\nu \varphi_\nu(x)$$

La rapidez con la que la secuencia de pesos tiende a 0 determinará el *suavizado* de este estimador.