修勻學(Graduation)－Bootstrap(拔靴法；梯雲縱)

授課教師：余清祥教授

課程日期：2024年12月18日

資料下載：
http://csyue.nccu.edu.tw

Monte Carlo vs. Bootstrap

- 蒙地卡羅(Monte Carlo)與拔靴法(Bootstrap)兩者操作方式類似：

→蒙地卡羅認為母體分配已知，從這個假設產生亂數，再從這些亂數探討問題，包括期望值、變異數、百分位數等母體性質；

→拔靴法「假設」**樣本就是母體**，從這個有限母體中產生亂數，再從這些亂數計算樣本統計量的**「變異數」**！

註：拔靴法的功能較為侷限。

- 蒙地卡羅的範例：Wilcoxon符號檢定

→檢查一組樣本的中位數是否等於某個定值，首先計算所有觀察值的秩(rank)，再乘以大於或小於中位數的符號，分別加總正負兩個秩(T^+、T^-)的總和，取較小者為統計檢定量。

→理論上，$T^+ + T^- = \dfrac{n(n+1)}{2}$。

→當樣本數較大時，

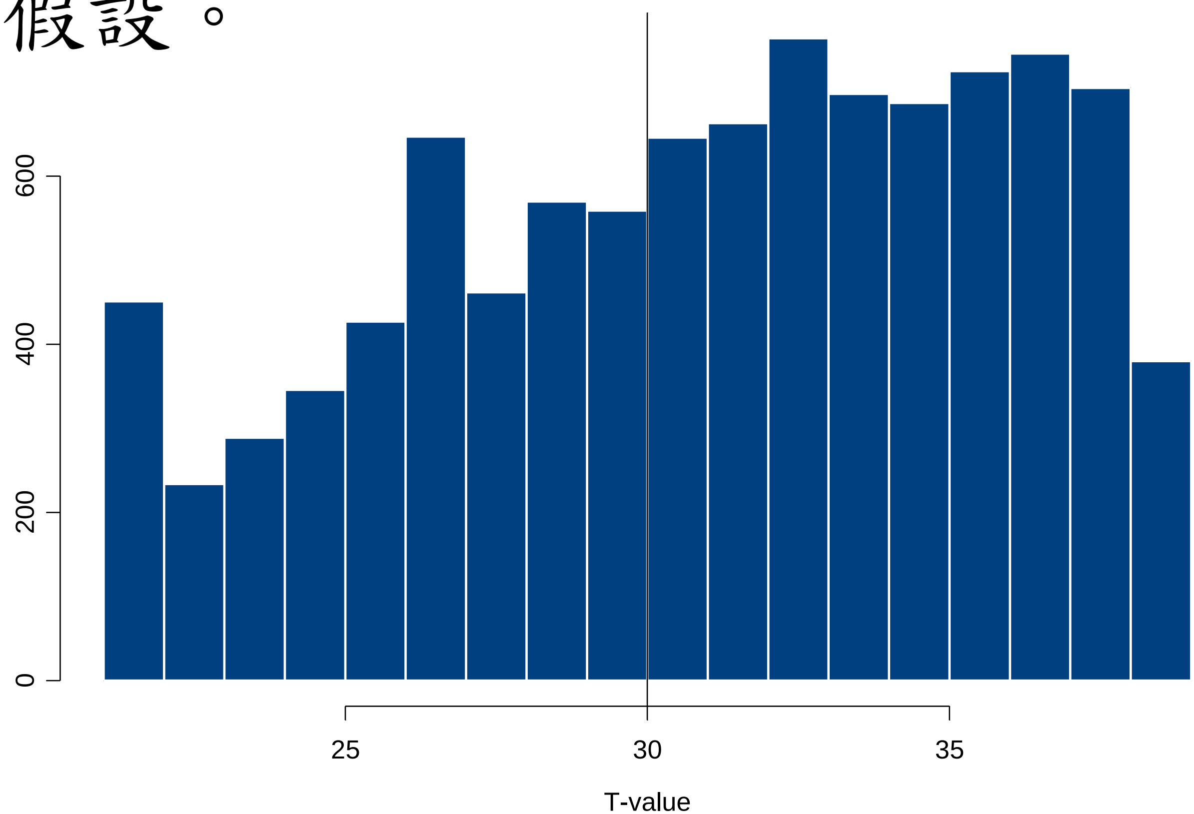
$$E(T) = \frac{n(n+1)}{4} \;\&\; Var(T) = \frac{n(n+1)(2n+1)}{24}.$$

註：假設 $X_i \sim i.i.d.\, N(m, \sigma^2), i = 1, 2, \ldots, n.$

Critical values of the Mann-Whitney-Wilcoxon test (α=.05, 10,000 runs, and numbers in red are the true critical values.)→差異不大！

	n_1=2	3	4	5	6	7	8	9	10
n_2=2	3	3	3	3	3	3	4	4	4
3	6	6	6	7	8	8	9	9	10
4	10	10	11	12	13	14	14(15)	16(15)	16
5	15	16	17	18	19	21	22	23	24
6	21	23	24	25	27	28	30	31(32)	33
7	28	30	32	34	35	37	39	41	43
8	37	39	41	43	45	47	49(50)	52	54
9	46	48	51(50)	53	56	58	61	63	66
10	56	58(59)	61	64	67	70	73	76	79

→以 $X_i \sim i.i.d.\ N(0,1),\ i=1,2,\ldots,12$ 為例，假設某組觀察值的檢定量為30，重複9,999次的模擬，計算出Monte-Carlo p-value等於(1+3985)/(1+9999) = 0.3986，不拒絕中位數為0的假設。



Monte Carlo p-value & Test

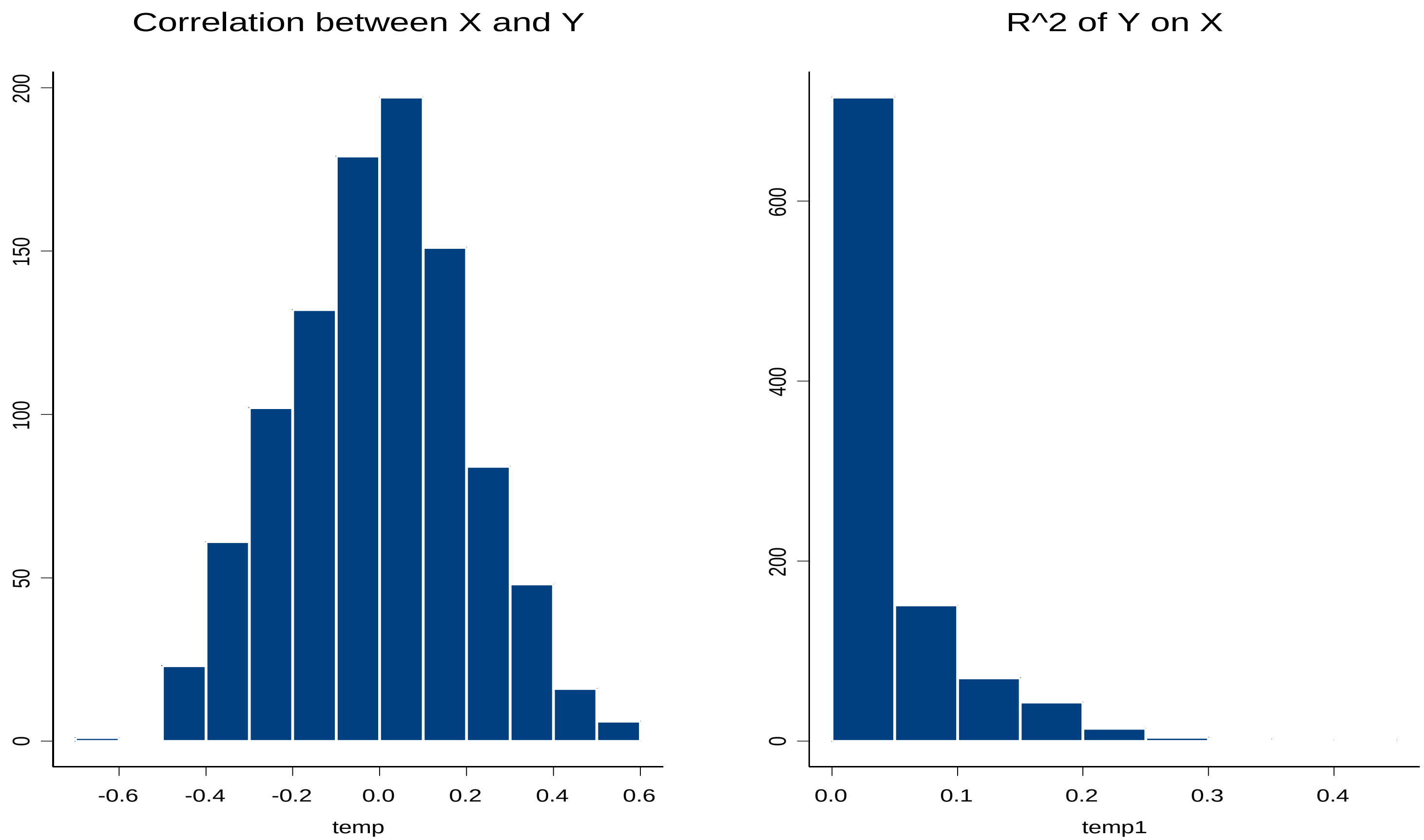
- 根據虛無假設模擬出 n 組樣本，如果觀察值排在第 k 個(也就是第 k 大)，則檢定的 p-value = $k/(n+1)$。一般顯著水準為0.05，n 值多半選為99、499、999、9,999或99,999等數字。

→Q：蒙地卡羅p-value與排列檢定的差別？

- 蒙地卡羅檢定的作法類似，再給定模型假設下，求出統計量等相關數值的分配。

→應用範例：迴歸分析中有人用調整過的 R^2，以消除因隨機而造成的線性相關。

- 隨機由$N(0,1)$產生互相獨立的25個 X、Y 觀察值，根據迴歸方程式 $Y=\alpha+\beta X$ 計算 R^2，重複1000次的模擬可得



→平均 R^2=4.2%，Q3＝5.9%。

Bootstrap(拔靴法)

- Bootstrap法可追塑至Efron於1979提出的方法，屬於重複抽樣(Resampling)方法。將已有的觀察值當作是母體重複抽樣(與Monte Carlo有真實母體不同！！)，以求取原先因資料不足而無法探討的資料特性，早期探討的特性以變異數為主。

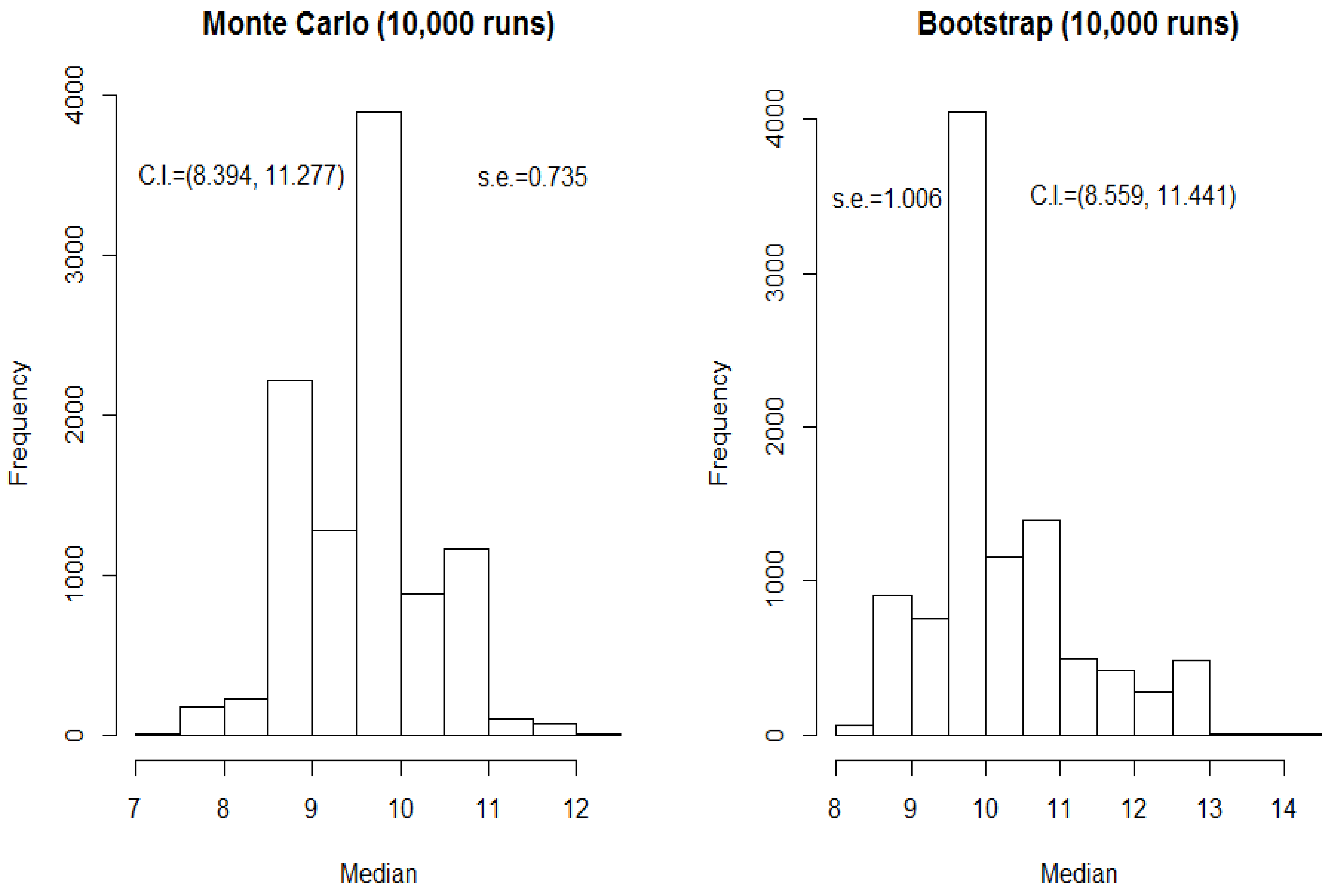
→舉例而言，假設 $x_1, x_2, \ldots, x_N$ 為來自同一分配的觀察值，而我們想瞭解這個分配的中位數與其中位數的變異數。

範例：一組由Poisson分配抽出的隨機樣本

6 7 7 7 7 8 8 8 9 9 9 9 10 10 10 10
11 11 12 13 13 13 13 14 15 15 15 15 17 20

→已知樣本中位數為10，欲求出母體中位數的信賴區間，可由Bootstrap模擬出標準差。10,000次模擬得出標準差估計值1.0063，中位數的95%信賴區間 (8.5586, 11.4414)涵蓋了實際中位數10。

註：母體為Poisson(10)；蒙地卡羅95%信賴區間為(8.3939, 11.2767) 。

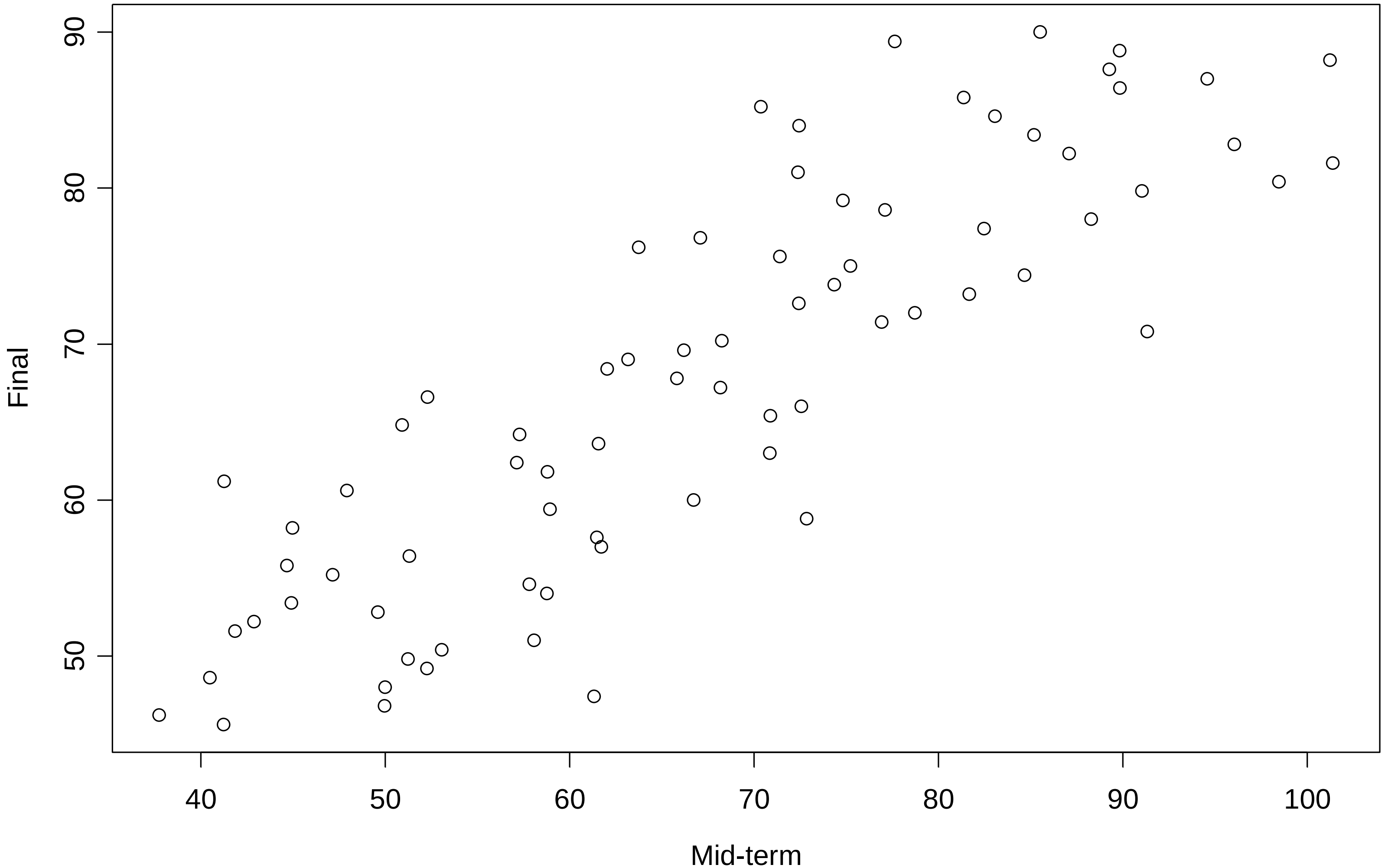


兩者的差異並不大！(標準誤0.7354 vs. 1.0063)

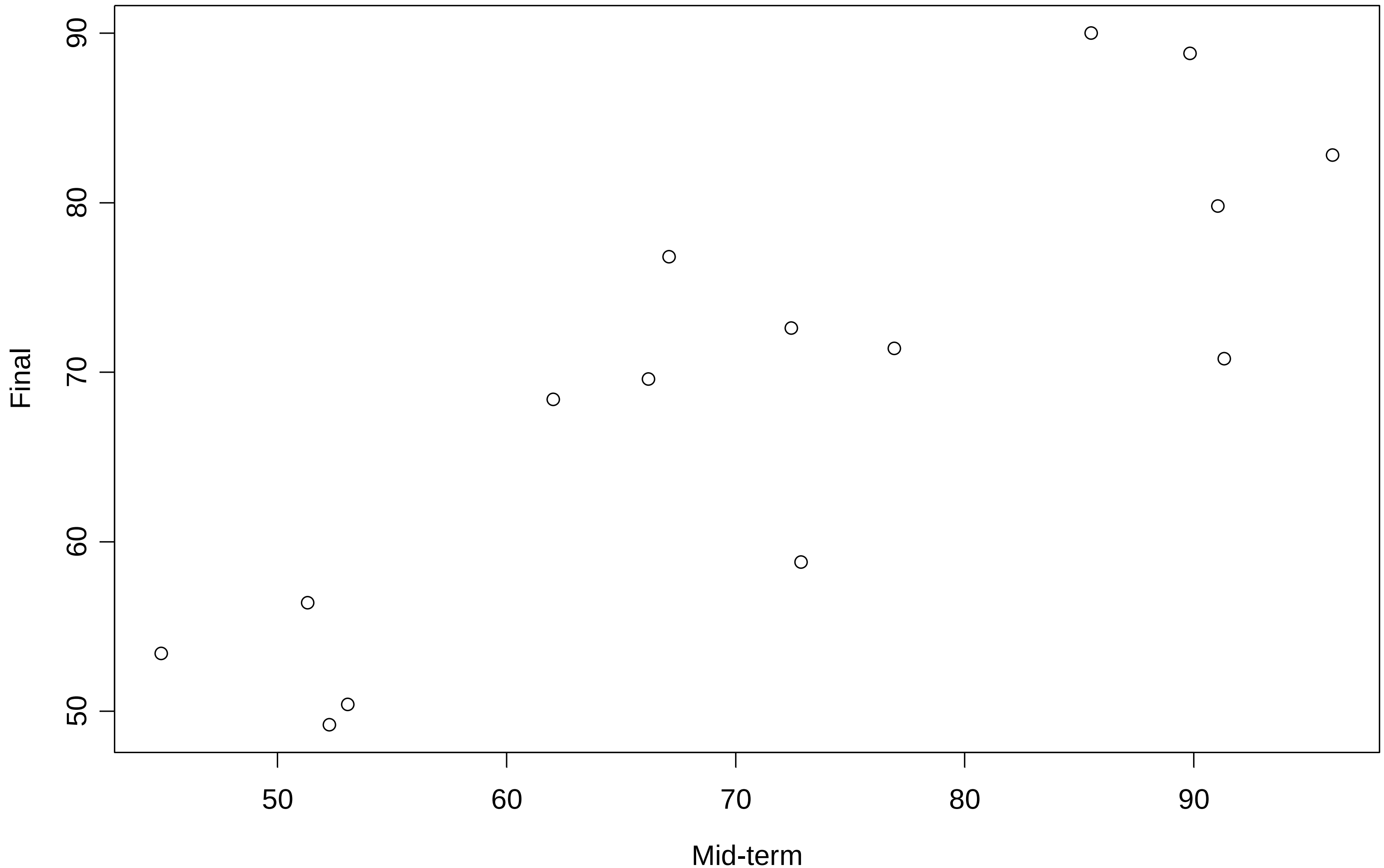
Monte Carlo及Bootstrap的模擬程式

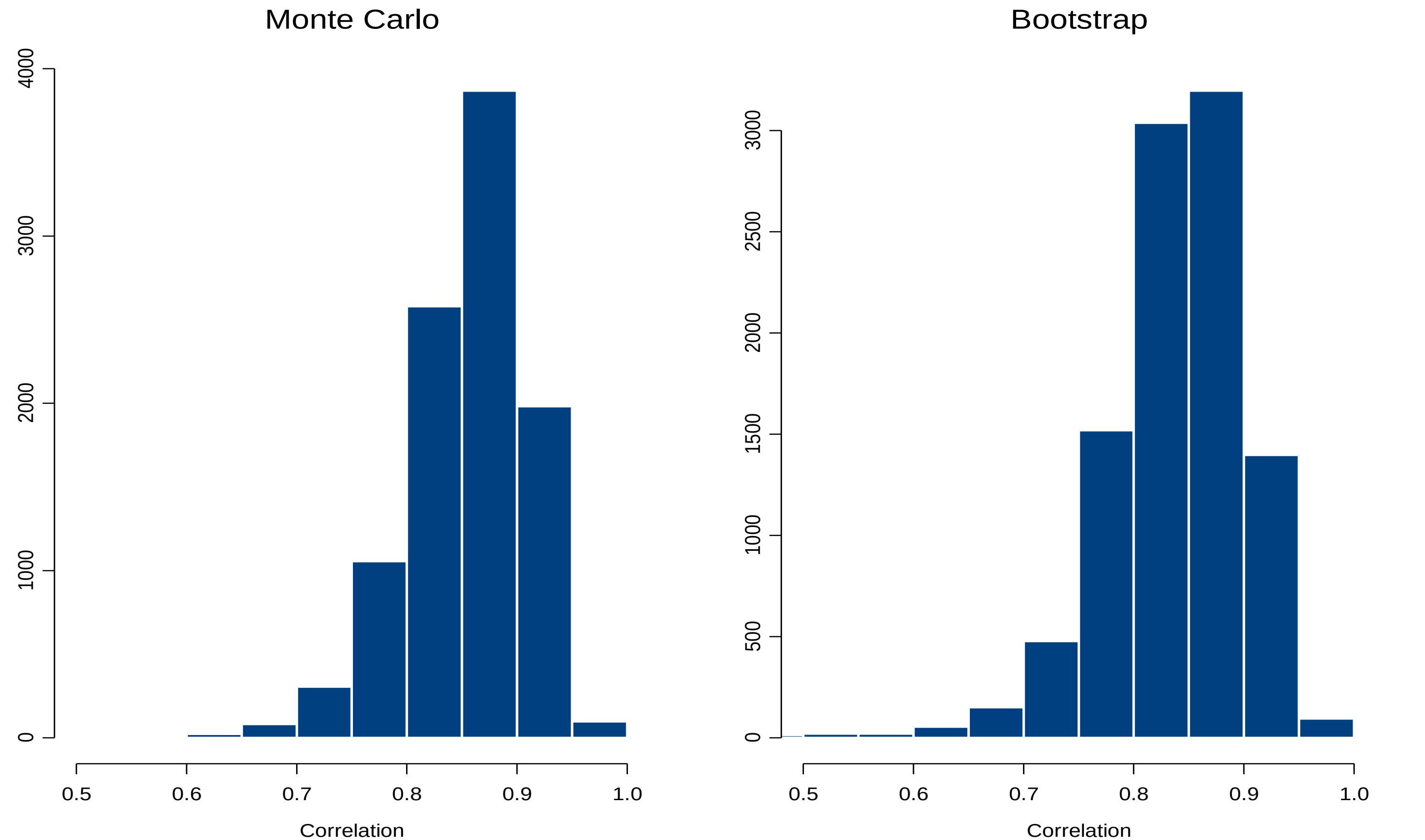
```
# Monte Carlo
t1=NULL
 for (i in 1:10000) {   x1=rpois(30,10) ;   y1=median(x1);   t1=c(t1,y1)   }
# Bootstrap
x0=rpois(30,10)
 t2=NULL
  for (i in 1:10000) {   x2=sample(x0,30,T);   y2=median(x2) ;  t2=c(t2,y2) }
#
a1=mean(t1)
 b1=sqrt(var(t1))
  b2=sqrt(var(t2))
par(mfrow=c(1,2))
 hist(t1,xlab="Median",main="Monte Carlo (10,000 runs)")
  text(8.2,3500,c("C.I.=(8.394, 11.277)"))
   text(11.5,3500,c("s.e.=0.735"))
 hist(t2,xlab="Median",main="Bootstrap (10,000 runs)")
  text(8.7,3500,c("s.e.=1.006"))
   text(12,3500,c("C.I.=(8.559, 11.441)"))
```

範例：75位選修統計學的學生，想瞭解期中考與總成績的相關性，只抽出15位學生。



抽出的15位學生與母體特性大致接近，相關係數分別是0.8399及0.8543。





比較各一萬次模擬，Monte Carlo法由母體任意抽出15個樣本得出的相關係數，與15個樣本以Bootstrap法算出的相關係數。

→ 兩者非常接近！(標準差0.0540 vs. 0.0654)

- 註：

(1) 理論上，我們認為

Bootstrap error

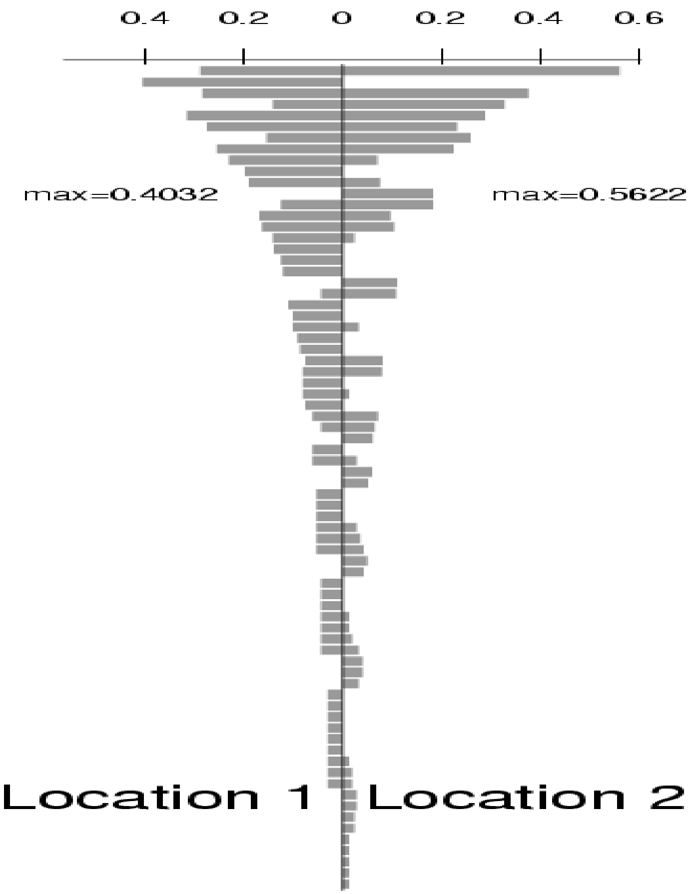
= Sampling error + bootstrap simulation error

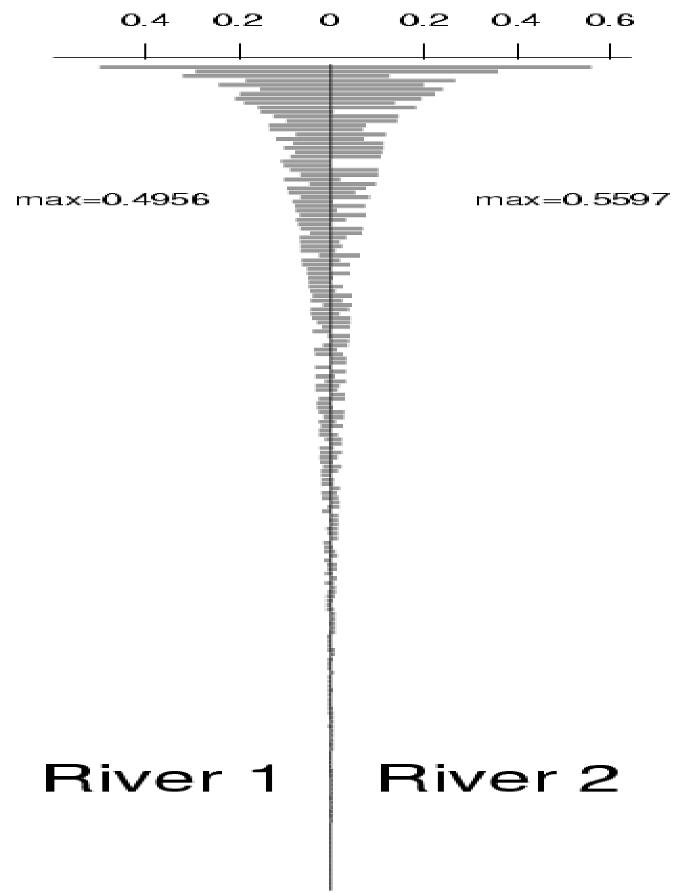
(2) 當有充足的樣本數、且樣本具有與母體類似的特性時，Bootstrap可用來近似分配的形狀。(Shift methods!)

(3) 請參考Bootstrap講義！

Bootstrap法估計變異數的實例

- 檢定兩個數值是否相等。





- Bootstrap法計算出的變異數(標準差)，與大樣本理論Delta 法的數值比較：

	Bootstrap	**Delta**
螃蟹資料	0.015	0.01426
水鳥資料	0.008	0.0083

Bootstrap用於檢定與預測

- 除了用於估計變異數外，也可用於檢定與預測。

→檢定可與變異數估計結合，在此將略過細節，僅以一個範例示範想法。

→預測多半與相關資料(Dependent data)有關，都屬於無母數方法，但至今仍無統一的方法。常見的方法有Block, Sieve, Local, Wild與Markov Bootstrap，以及Subsampling，在此只介紹Block Bootstrap。

區塊(Block)拔靴法

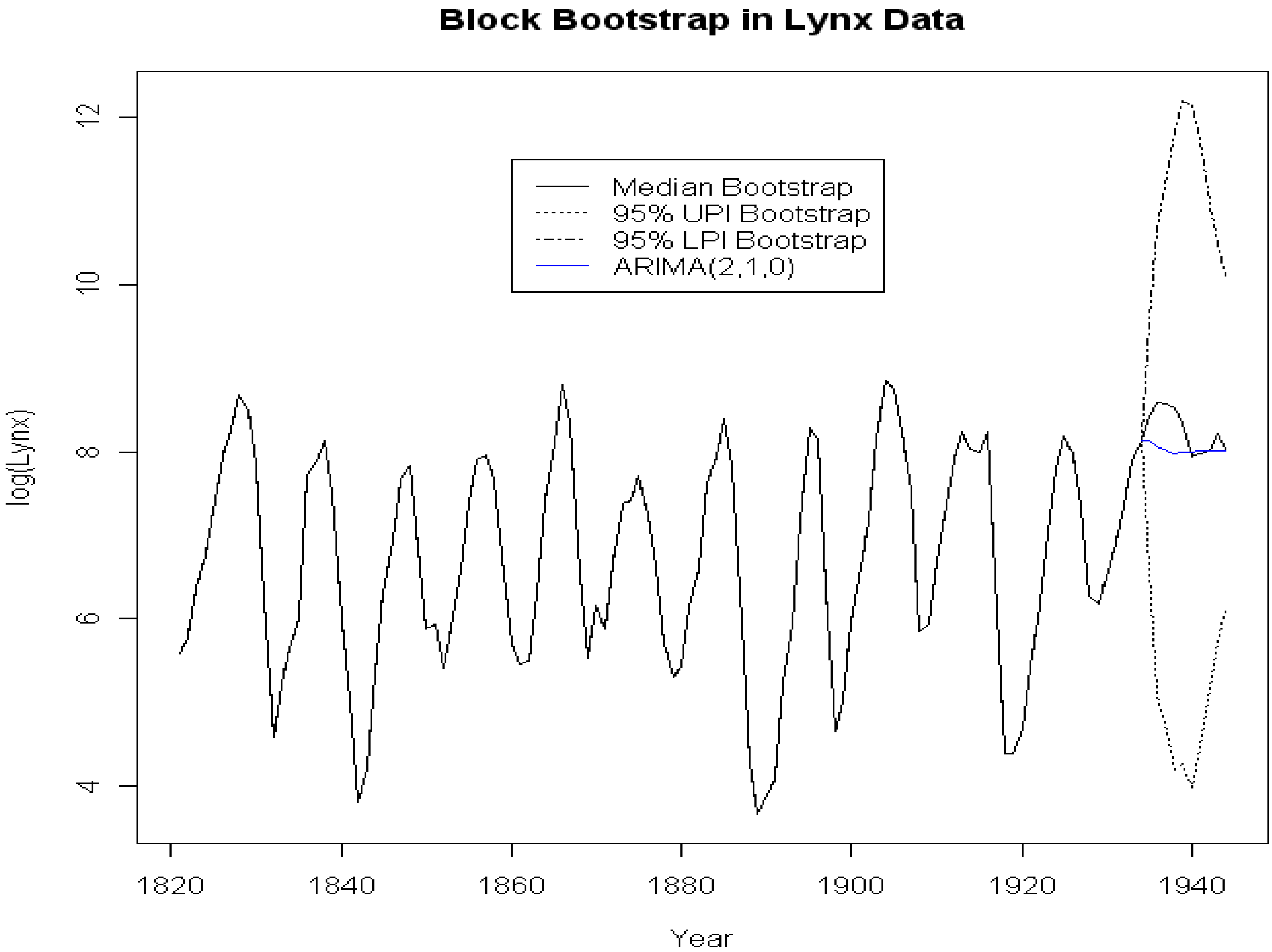
- 區塊拔靴法的重複抽樣方式類似一般的拔靴法，只是每次抽取一個「區塊」的資料，當資料服從均衡(Stationary)假設時，區塊拔靴法大多都適用。

→區塊拔靴法用於相關資料有不錯的效果，雖然不如獨立樣本時一般拔靴法的準確，但比Subsampling效果好，而且不需要資料滿足很強的條件，加上操作時不需對資料給予任何假設，實證上是很好的選擇。

- 區塊拔靴法的抽樣方式類似拔靴法，但不是對觀察值直接抽樣，而是對相鄰觀察值的差異抽樣，而且抽取時將連續一串的差異值抽出。例如：若區塊長度為b、且抽到第 k 個觀察值，則第 k 個至第 $k+b-1$ 個差異值被抽出，最後一個觀察值加上這些差異值即為預測值。
- R的模組「boot」也有處理時間數列資料(相關資料的一種)的功能，細節可查閱「tsboot」指令。(這個指令可指定區塊長度為定值、或是服從幾何分配。)

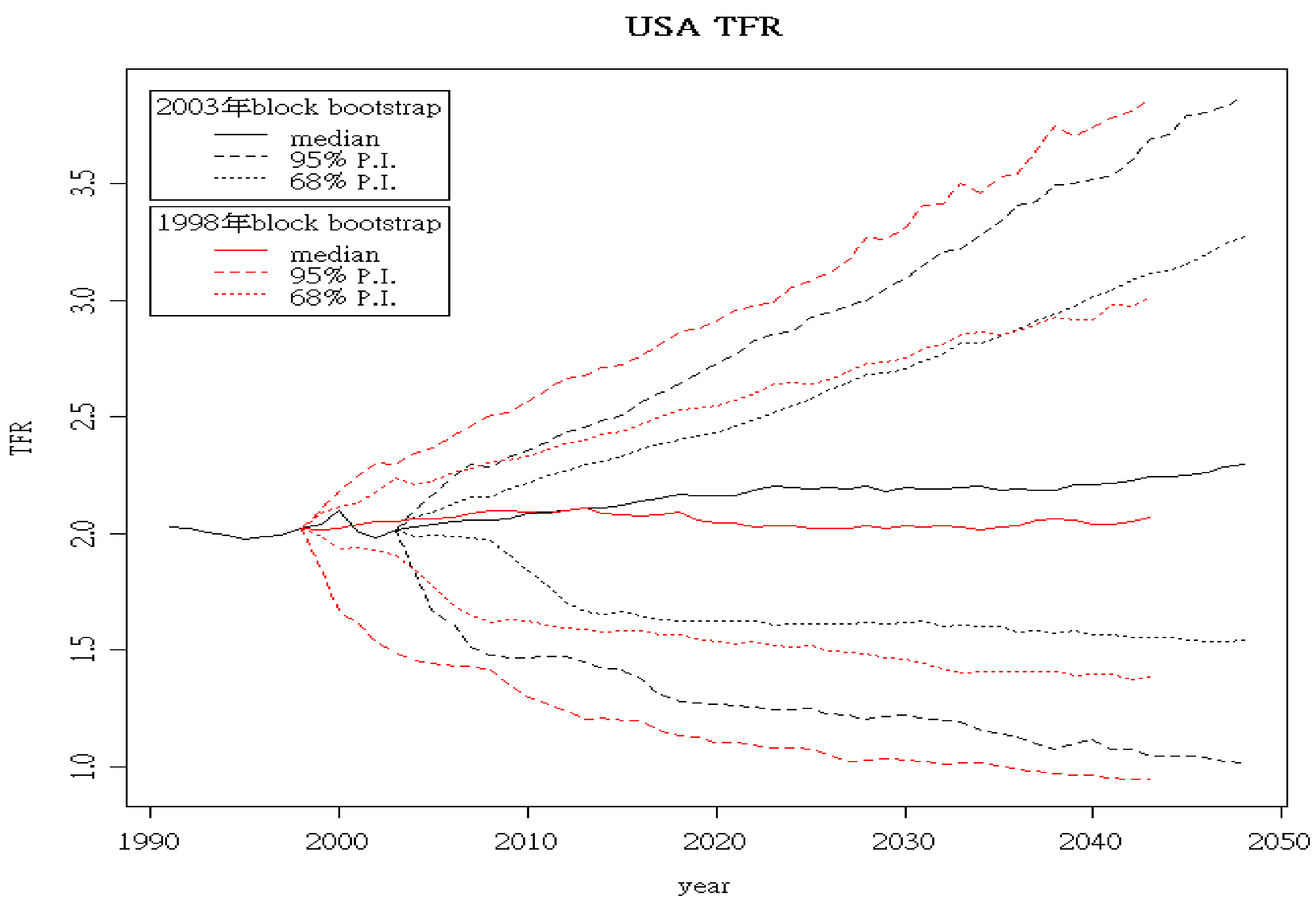
- 範例： R的說明檔中使用「lynx」資料，一共有114筆資料。使用tsboot指令，可限定固定區塊長度，也可指定區塊長度服從幾何分配。（兩者得出的結果非常接近。1821~1924 vs. 1925~1934, b=10）

→ 首先對「lynx」資料取對數，再計算相鄰時間觀察值的差值，之後抽出一整個區塊差值，加到最後一期的觀察值。下圖為依據一千次區塊拔靴法的模擬，計算而得的95%預測區間，與差分後的AR(2)模型之預測值之比較。

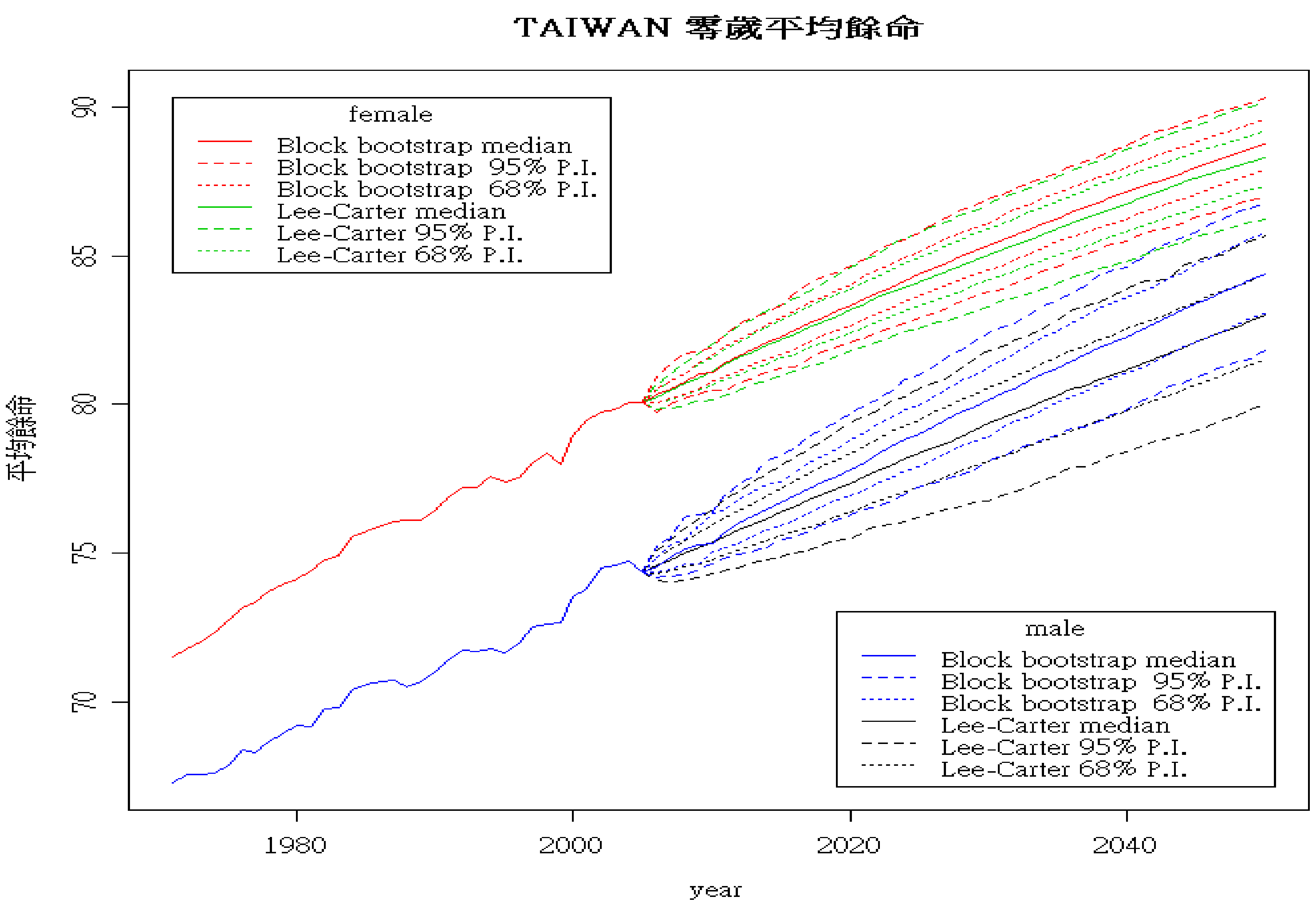


Block Bootstrap in Lynx Data
Median Bootstrap
95% UPI Bootstrap
95% LPI Bootstrap
ARIMA(2,1,0)
log(Lynx)
4
6
8
10
12
1820
1840
1860
1880
1900
1920
1940
Year

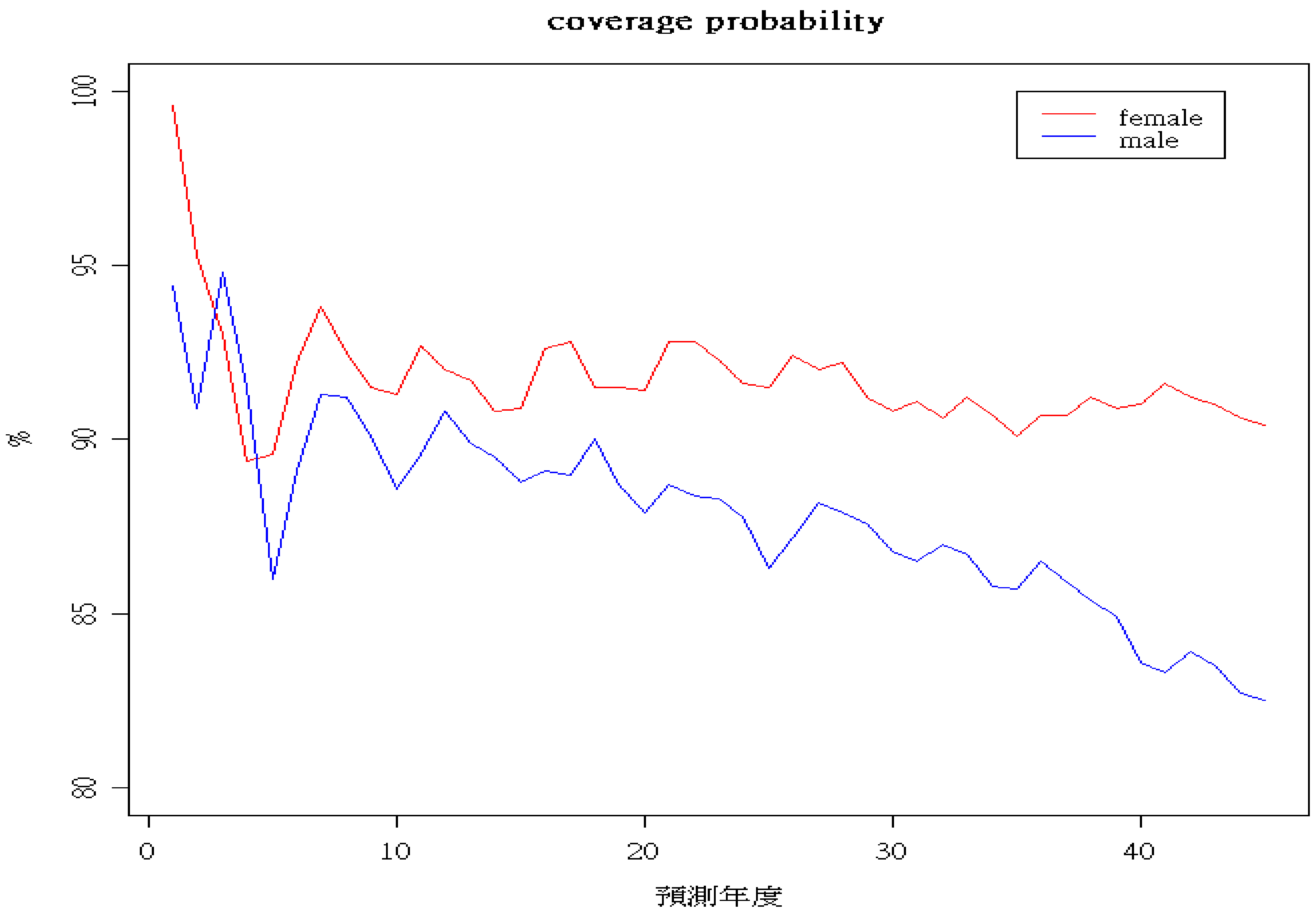
區塊拔靴法範例：美國總生育率預測



區塊拔靴法範例：臺灣死亡率模型預測



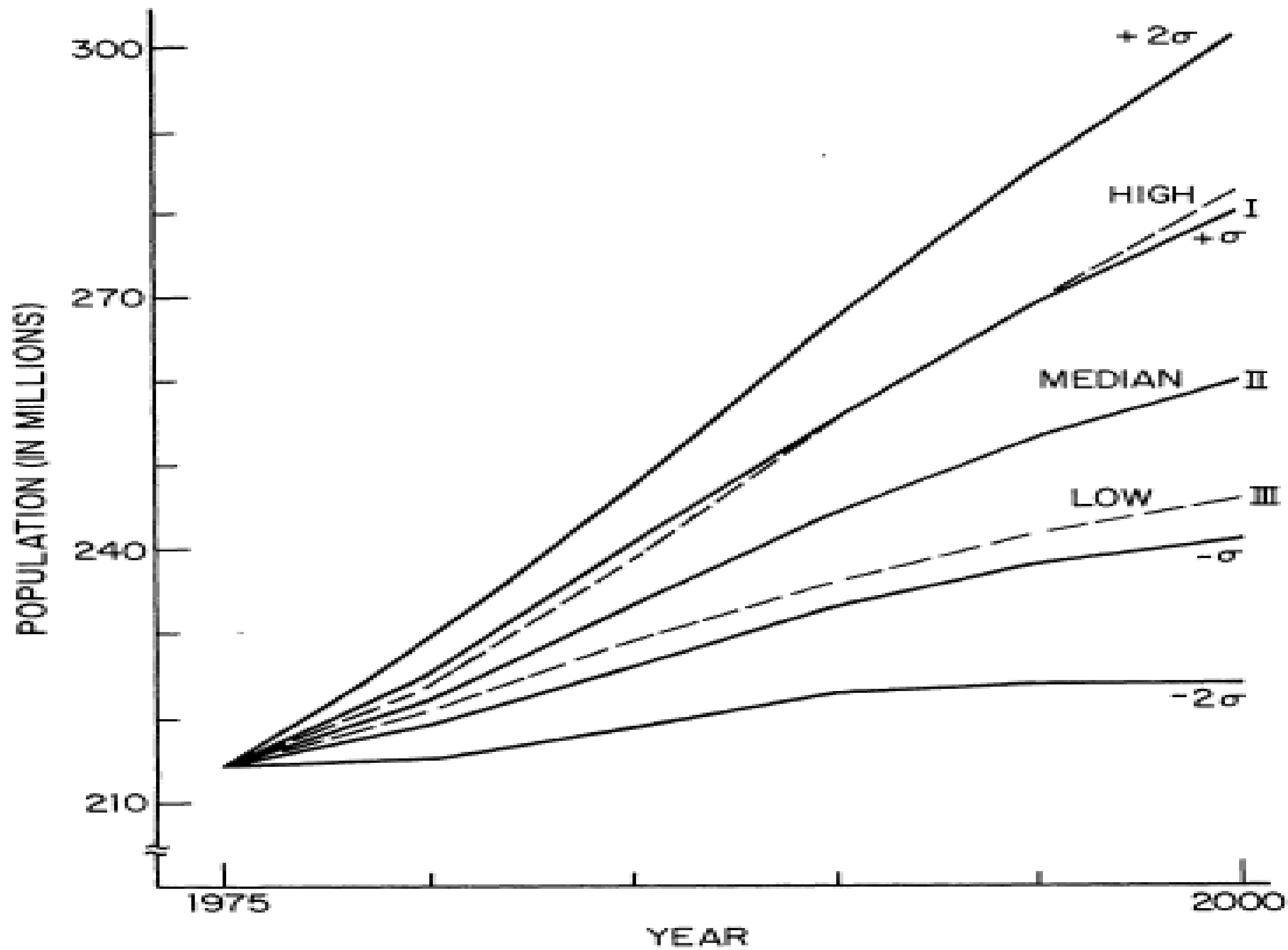
區塊拔靴法的涵蓋率



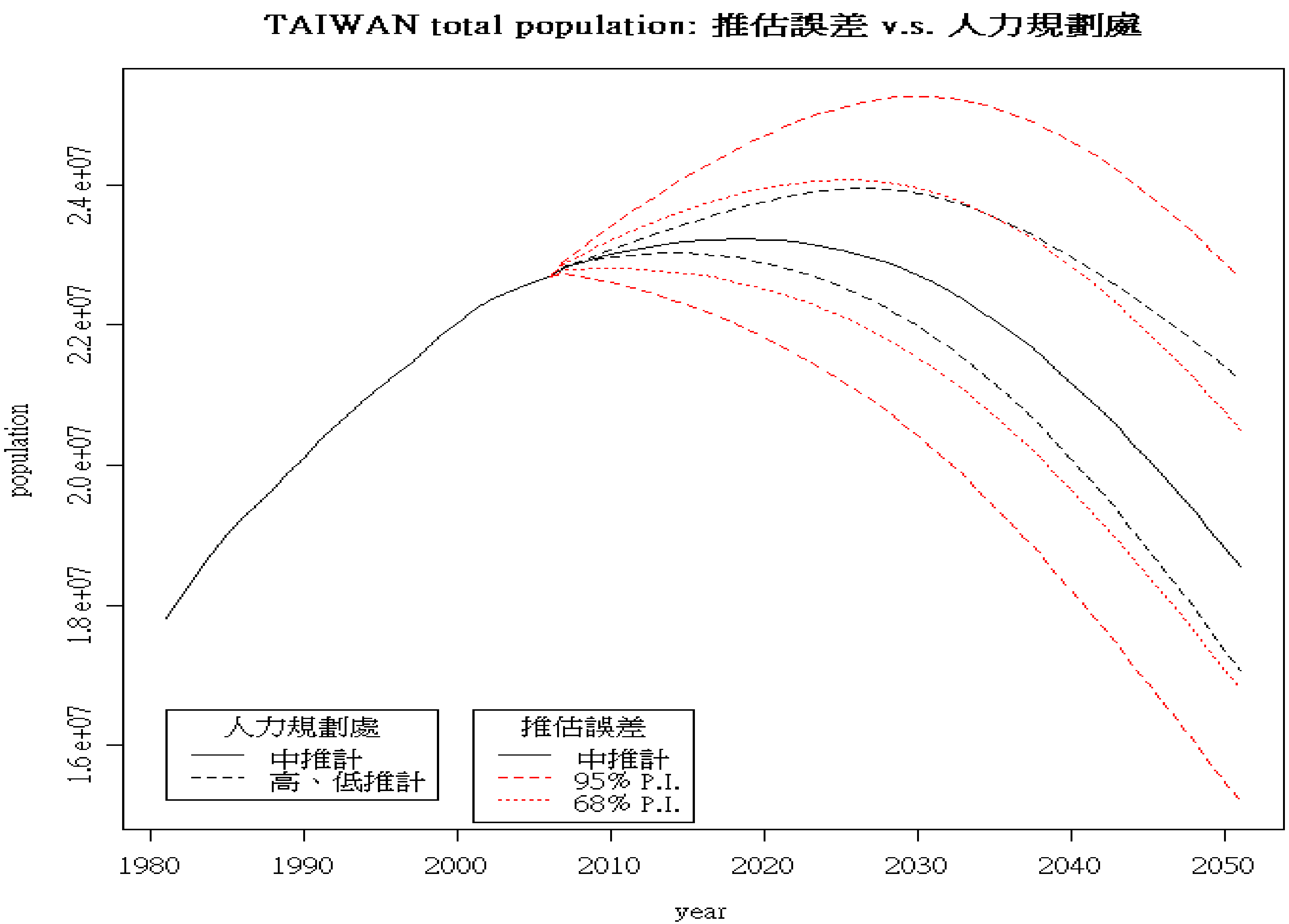
coverage probability
female
male
100
95
90
85
80
%
0
10
20
30
40
預測年度

Stoto (1983):美國、聯合國

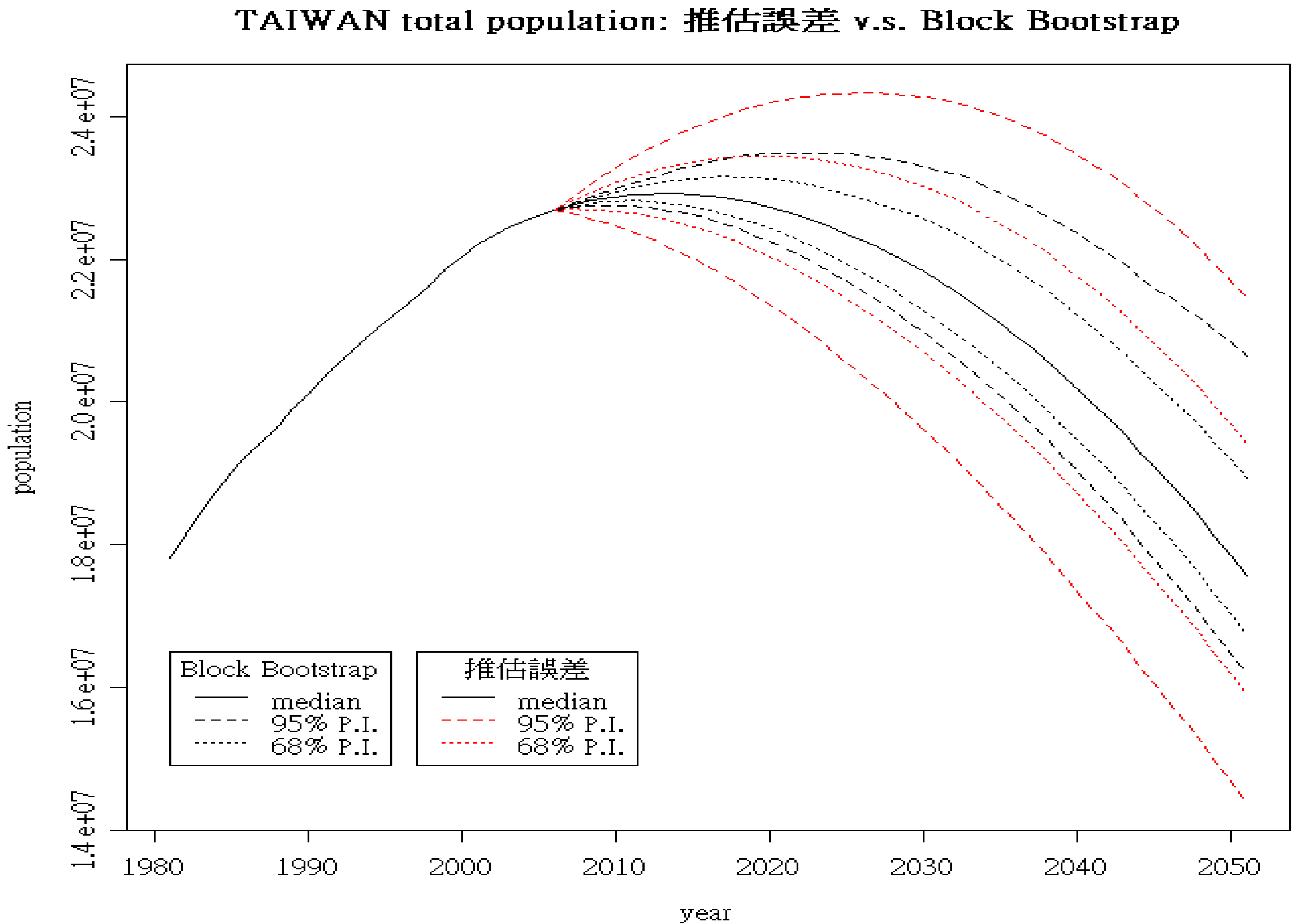
→68%預測區間的上、下限，與美國(Census Bureau, 1977) 的高、低推計非常接近。



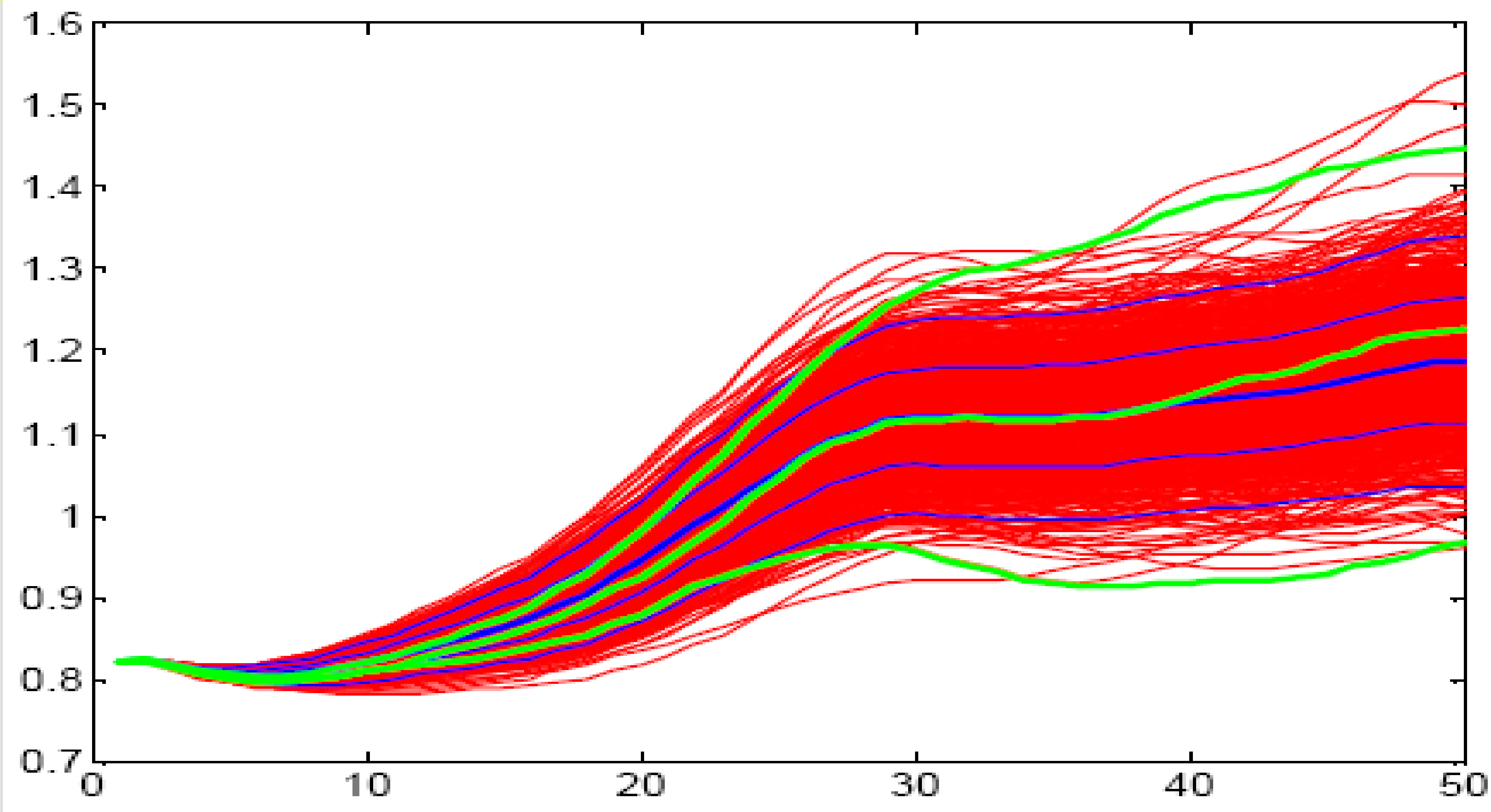
台灣推估誤差（人力規劃處）



台灣推估誤差（區塊拔靴法）



隨機方法推估之呈現 (電腦模擬)

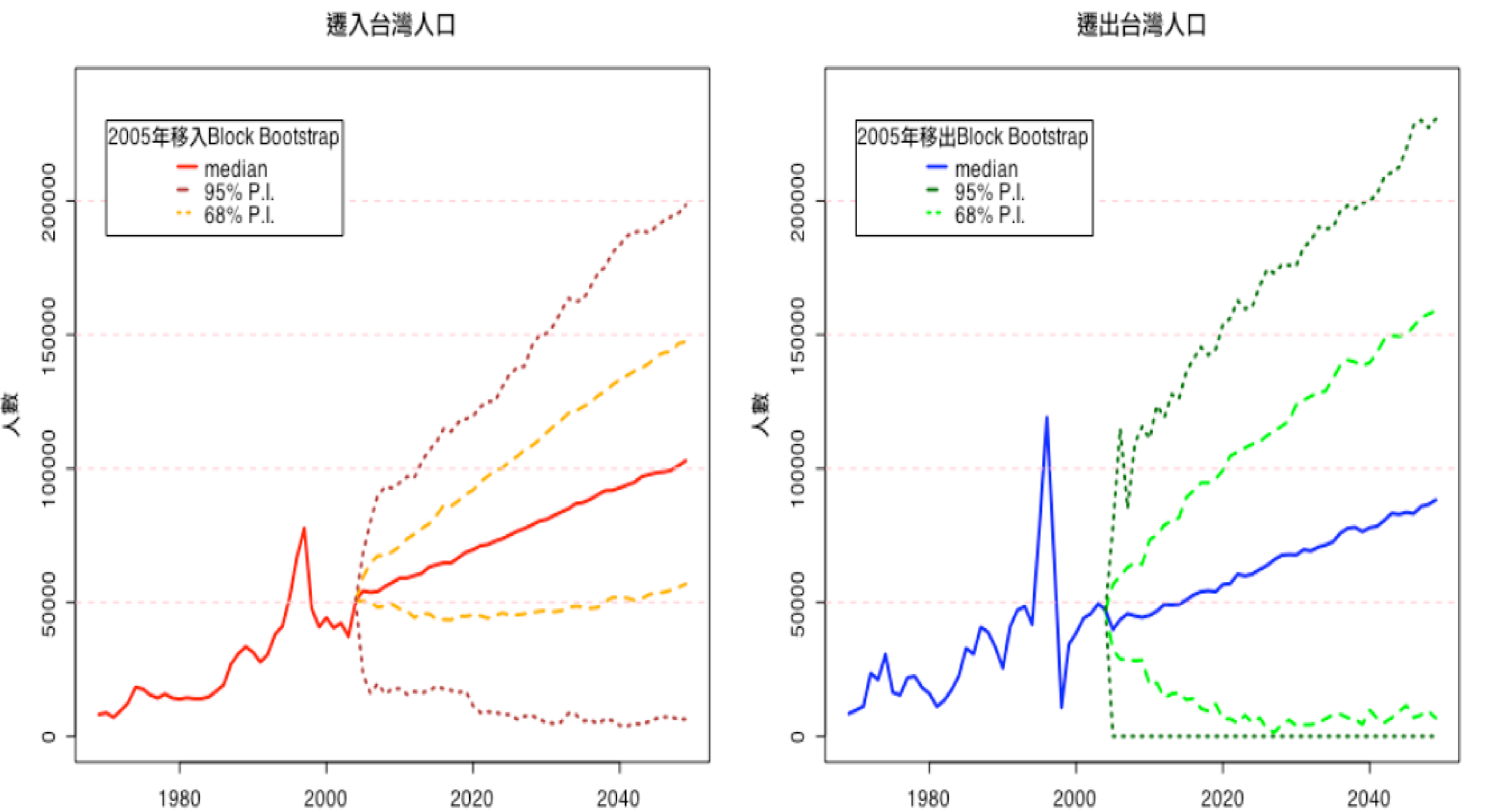


Red:　德國 2002-2050年依賴人口比之模擬路徑

Green: 加總後中位數、最小值及最大值對應之路徑

Blue:　平均值、 68%預測區間及95%預測區間

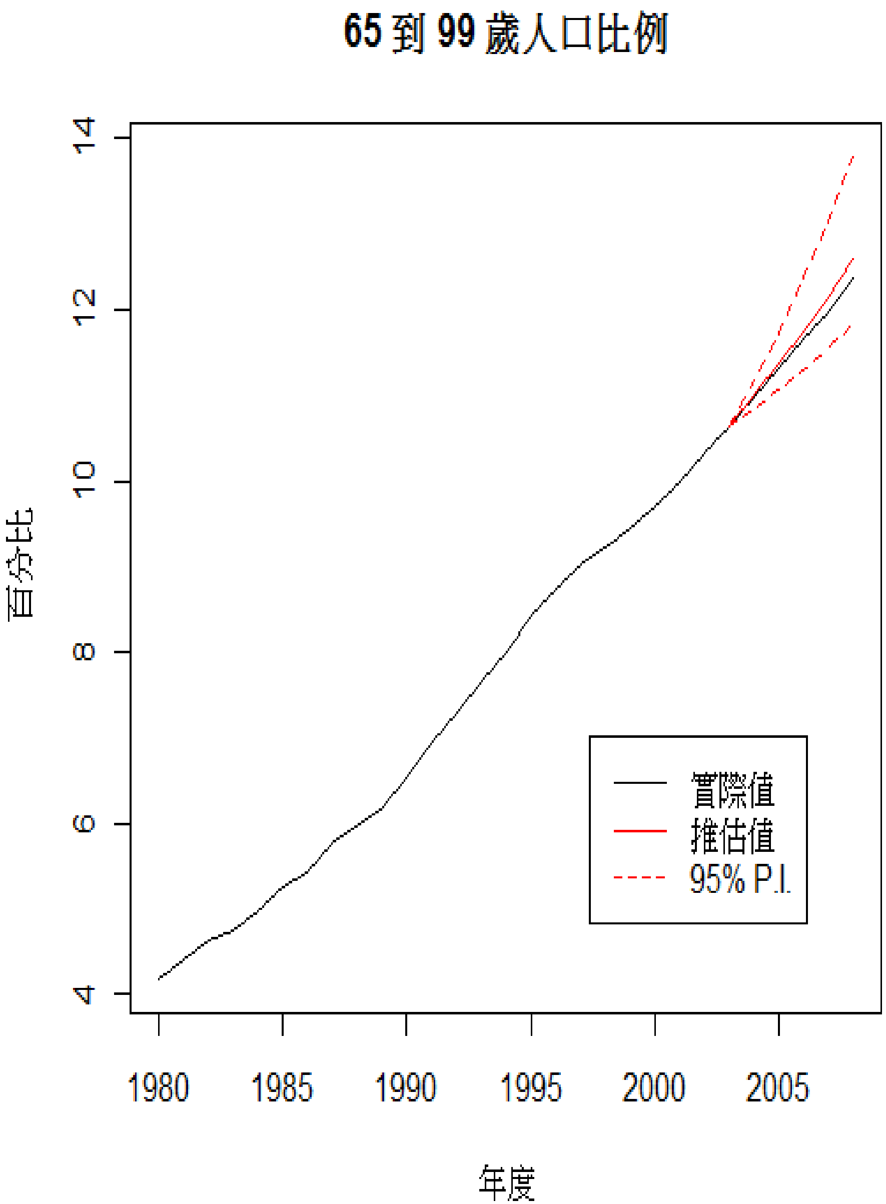
隨機方法推估之呈現 (區塊拔靴法)

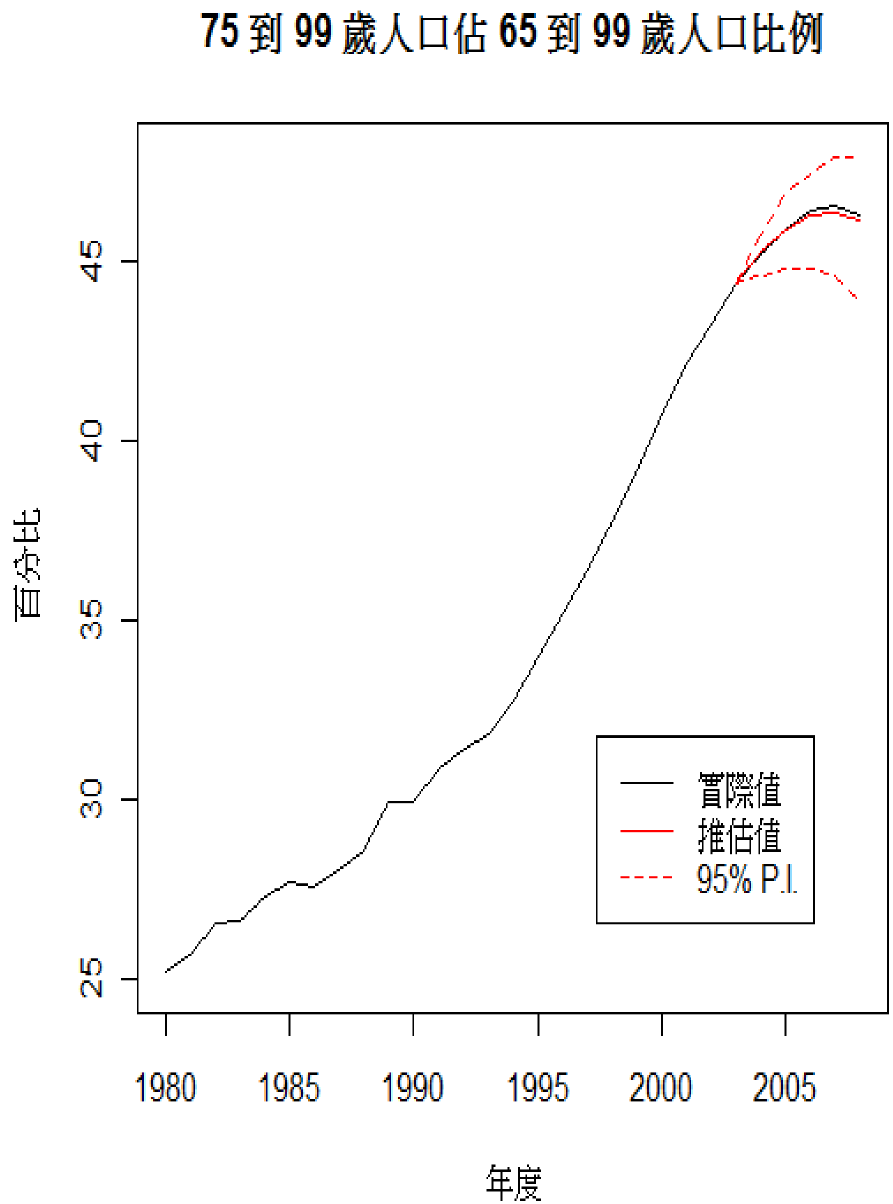


臺灣的人口遷移(遷入與遷出)推估
(中位數、 68%預測區間及95%預測區間)

資料來源：李芯柔、余清祥 (2008)

區塊拔靴法範例：臺北市高齡人口比例

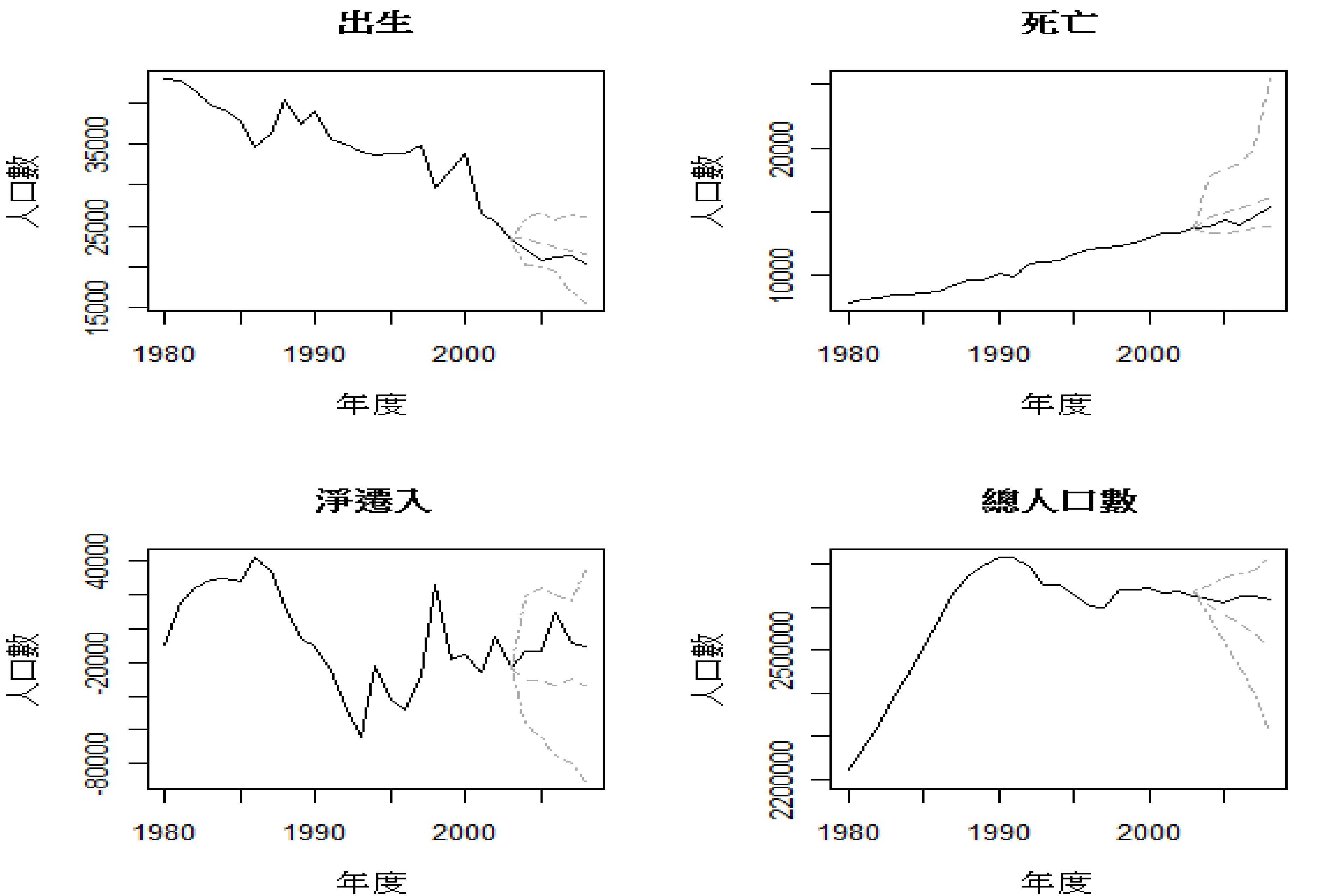




不同推估方法的誤差比較
（臺北市人口推估）

要素	本研究	臺北市主計處			
		世代生存法	迴歸分析法	ARIMA (直接)	ARIMA (間接)
總人口	0.80	1.70	3.17	0.87	1.38

臺北市區塊拔靴法推估值（虛線為推估值）



幾種死亡率推估方法

方法	方法設定	參數
Block Bootstrap	Linear Weight	Block size = 5
Lee-Carter	LC	SVD
	LC	PCA
Sieve	AR	AR(p)
FPCA	BSpline	8 basis functions
	Monomial	8 basis functions
	Polygonal	Knot 數由資料決定

雲林及嘉義兩縣在不同方法下的平均MAPE

(%)	Block	LC		Sieve	FPCA		
		SVD	PCA		BSpline	Polygonal	Monomial
Estimate	NA	8.03	8.03	NA	0.00	0.00	0.00
Forecast	11.73	12.03	12.03	10.26	20.21	13.42	19.28