

DATA SCIENCE

Modelo estadístico Bayesiano para datos binarios desbalanceados

Alex de la Cruz¹, Jorge Bazán²

¹ aldehu@usp.br ^{1,2}Universidad de São Paulo, Brasil.

Lima, 05 de octubre

- 1 Introducción
- 2 Regresión binaria
 - Función de enlace
- 3 Regresión binaria potencia e reversa de potencia
- 4 Inferencia Bayesiana de los parámetros
- 5 Implementación en Python
- 6 Aplicación
- 7 Principales referencias



1. Introducción

El modelo matemático que intenta explicar una variable a partir de una función de otras variables es llamado modelos de regresión.

1. Introducción

El modelo matemático que intenta explicar una variable a partir de una función de otras variables es llamado modelos de regresión.

Modelos Lineales Generalizados (MCCULLAGH; NELDER, 1989). Considere una variable respuesta, un conjunto de covariables y coeficientes de regresión, respectivamente dadas por:

El modelo matemático que intenta explicar una variable a partir de una función de otras variables es llamado modelos de regresión.

Modelos Lineales Generalizados (MCCULLAGH; NELDER, 1989). Considere una variable respuesta, un conjunto de covariables y coeficientes de regresión, respectivamente dadas por:

$$\mathbf{Y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix} \quad \mathbf{y} \quad \boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^{\top}$$

. Con esto

$$\mathbf{Y} \overset{\text{explicado por}}{\leftarrow} \mathbf{X}$$
 $\mu \qquad f(\cdot)$



2. Modelos de regresión Binaria

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica.

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica. Sea:

 $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^{\top}$ vector de respuestas con valores 1 o 0.

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica.

- $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^{\top}$ vector de respuestas con valores 1 o 0.
- $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^{\top}$ vector de p covariables.

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica.

- $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^{\top}$ vector de respuestas con valores 1 o 0.
- $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^{\top}$ vector de p covariables.

2. Modelos de regresión Binaria

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica.

- $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^{\top}$ vector de respuestas con valores 1 o 0.
- $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^{\top}$ vector de p covariables.
- $\blacksquare \beta = (\beta_1, \dots, \beta_p)^{\top}$ coeficientes de regresión.

Modelos de regresión Binaria

Nos interesa estudiar la relación de un conjunto de covariables y una variable respuesta dicotómica.

- $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_n)^{\top}$ vector de respuestas con valores 1 o 0.
- $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^{\top}$ vector de p covariables.
- $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^{\top}$ coeficientes de regresión.

Modelos de regresión Binaria

$$Y_i \sim \text{Bernoulli}(u_i) \text{ independientes} \quad \forall i = 1, ..., n$$

$$u_i = P(Y_i = 1) = F(\eta_i)$$

$$\eta_i = \mathbf{x}_i^T \boldsymbol{\beta} = \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + ... + \beta_p x_{ip}$$

$$(1)$$

2. Modelos de regresión Binaria

Función de enlace

Función de enlace

Relaciona η_i y μ_i

$$\eta_{i} = g(\mu_{i})
u_{i} = P(Y_{i} = 1)
\eta_{i} = \beta_{1}x_{i1} + \ldots + \beta_{p}x_{ip}
i = 1, \ldots, n$$
(2)

2. Modelos de regresión Binaria

Función de enlace

Relaciona η_i y μ_i

$$\eta_{i} = g(\mu_{i})
u_{i} = P(Y_{i} = 1)
\eta_{i} = \beta_{1}x_{i1} + \ldots + \beta_{p}x_{ip}
i = 1, \ldots, n$$
(2)

Ejemplo: modelo de regresión logística

$$\eta = \log\left(\frac{\mu}{1-\mu}\right)$$

$$\mu = \frac{\exp\left(\beta_1 x_1 + \ldots + \beta_p x_p\right)}{1 + \exp\left(\beta_1 x_1 + \ldots + \beta_p x_p\right)}$$

2. Modelos de regresión Binaria

Curvas de probabilidad acumulada.

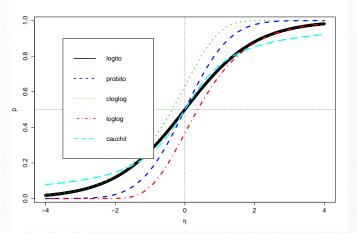


Figura 1: Enlaces comunes → ◆□ ▶ ◆ ■ ▶ ◆ ■ ▶ ◆ ■ ▶ ◆ ■

Está basado en las distribuciones potencia y reversa de potencia de Lemonte e Bazán (2017).

Está basado en las distribuciones potencia y reversa de potencia de Lemonte e Bazán (2017).

Distribución potencia y reversa de potencia

Una variable aleatoria univariada T tiene distribución potencia si su fda es dada por:

$$F_p(t \mid \mu, \sigma) = G\left(\frac{t - \mu}{\sigma}\right)^{\lambda}, \quad t \in \mathbb{R},$$
 (3)

Está basado en las distribuciones potencia y reversa de potencia de Lemonte e Bazán (2017).

Distribución potencia y reversa de potencia

Una variable aleatoria univariada T tiene distribución potencia si su fda es dada por:

$$F_p(t \mid \mu, \sigma) = G\left(\frac{t - \mu}{\sigma}\right)^{\lambda}, \quad t \in \mathbb{R},$$
 (3)

y su correspondiente función reversa de potencia

$$F_{rp}(t \mid \mu, \sigma) = 1 - G\left(-\left(\frac{t - \mu}{\sigma}\right)\right)^{\lambda}, \quad t \in \mathbb{R}$$
 (4)

Así tenemos dos tipos de función de enlace

Así tenemos dos tipos de función de enlace

Potencia

$$\mu_i = F_p(\eta_i) = G(\eta_i)^{\lambda}, \quad \eta_i = F_p^{-1}(\mu_i)$$
 (5)

Así tenemos dos tipos de función de enlace

Potencia

$$\mu_i = F_p(\eta_i) = G(\eta_i)^{\lambda}, \quad \eta_i = F_p^{-1}(\mu_i)$$
 (5)

Reversa de potencia

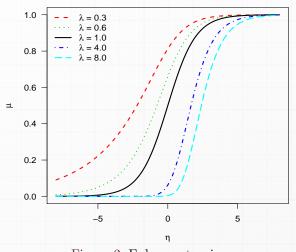
$$\mu_i = F_{rp}(\eta_i) = 1 - G(-\eta_i)^{\lambda}, \quad \eta_i = F_{rp}^{-1}(\mu_i)$$
 (6)

en que $\eta_i = \mathbf{x_i}^{\top} \boldsymbol{\beta} = \beta_1 x_{i1} + \ldots + \beta_k x_{ip}$ es el i-ésimo predictor lineal, $i = 1, \ldots, n$

Tabela 1: Modelos para regresión binaria usando enlace de potencia e reversa de potencia

Modelo	Notação	μ	η
Potência normal	PN	$\left[\Phi\left(\eta\right)\right]^{\lambda}$	$\eta = \Phi^{-1} \left(\mu^{1/\lambda} \right)$
Reversa de potência normal	RPN	$1 - \left[\Phi\left(-\eta\right)\right]^{\lambda}$	$\eta = -\Phi^{-1}\left((1-\mu)^{1/\lambda}\right)$
Potência logística	PL	$\left[\frac{1}{1+\exp(-\eta)}\right]^{\lambda}$	$\eta = -\log\left(\mu^{-1/\lambda} - 1\right)$
Reversa de potência logística	RPL	$1 - \left[\frac{1}{1 + \exp(\eta)}\right]^{\lambda}$	$\eta = \log \left((1-\mu)^{-1/\lambda} - 1 \right)$
Potência Laplace	PLAPLACE	$\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \mathrm{sign}\left(\eta\right) \left\{1 - \mathrm{e}^{- \eta }\right\}\right]^{\lambda}$	$\eta = {\it G}_{1}^{-1}\left(\mu^{1/\lambda}\right)$
Reversa de potência Laplace	RPLAPLACE	$1 - \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} \text{sign}(\eta) \left\{1 - e^{- \eta }\right\}\right]^{\lambda}$	$\eta = -G_1^{-1} \left((1-\mu)^{1/\lambda} \right)$
Potência Cauchy	PC	$\left[\frac{1}{\pi}\arctan\left(\eta\right)+\frac{1}{2}\right]^{\lambda}$	$\eta = \tan\left[\left(\mu^{1/\lambda} - \frac{1}{2}\right)\pi\right]$
Reversa de potência Cauchy	RPC	$1-\left[rac{1}{\pi}rctan\left(-\eta ight)+rac{1}{2} ight]^{\lambda}$	$\eta = - an\left[\left((1-\mu)^{1/\lambda} - rac{1}{2} ight)\pi ight]$

 $G_1^{-1}(\cdot)$ es la inversa de la FDA de una distribución Laplace



El modelo Bayesiano para regresión binaria con enlaces potencia y reversa de potencia es dado por:

El modelo Bayesiano para regresión binaria con enlaces potencia y reversa de potencia es dado por:

$$Y_{i} \mid \beta, \lambda \sim \text{Bernoulli}(u_{i}) \quad \forall i = 1, ..., n$$

$$u_{i} = F_{\lambda}(\eta_{i})$$

$$\eta_{i} = \mathbf{x}_{i}^{T} \boldsymbol{\beta}$$

$$(\boldsymbol{\beta}, \lambda) \sim \pi(\boldsymbol{\beta}, \lambda)$$

$$(7)$$

El modelo Bayesiano para regresión binaria con enlaces potencia y reversa de potencia es dado por:

$$Y_{i} \mid \beta, \lambda \sim \text{Bernoulli}(u_{i}) \quad \forall i = 1, ..., n$$

$$u_{i} = F_{\lambda}(\eta_{i})$$

$$\eta_{i} = \mathbf{x}_{i}^{T} \boldsymbol{\beta}$$

$$(\boldsymbol{\beta}, \lambda) \sim \pi(\boldsymbol{\beta}, \lambda)$$

$$(7)$$

donde $F_{\lambda}(\cdot)$ es una FDA de una distribución potencia o reversa de potencia y $\pi(\beta, \lambda)$ es la distribución conjunta *a priori* de los parámetros.

El modelo Bayesiano para regresión binaria con enlaces potencia y reversa de potencia es dado por:

$$Y_{i} \mid \beta, \lambda \sim \text{Bernoulli}(u_{i}) \quad \forall i = 1, ..., n$$

$$u_{i} = F_{\lambda}(\eta_{i})$$

$$\eta_{i} = \mathbf{x}_{i}^{T} \boldsymbol{\beta}$$

$$(\boldsymbol{\beta}, \lambda) \sim \pi(\boldsymbol{\beta}, \lambda)$$

$$(7)$$

donde $F_{\lambda}(\cdot)$ es una FDA de una distribución potencia o reversa de potencia y $\pi(\beta, \lambda)$ es la distribución conjunta *a priori* de los parámetros.

$$L(\beta, \lambda \mid \mathbf{y}, \mathbf{X}) = \prod_{i=1}^{n} \left[F_{\lambda} \left(\eta_{i} \right) \right]^{y_{i}} \left[1 - F_{\lambda} \left(\eta_{i} \right) \right]^{1 - y_{i}}$$
(8)

Con $\delta = \log(\lambda)$, $\delta \in \mathbb{R}$ asumimos independencia entre β y δ , luego

Con $\delta = \log(\lambda)$, $\delta \in \mathbb{R}$ asumimos independencia entre β y δ , luego

$$\pi(\boldsymbol{\beta}, \delta) = \pi_1(\boldsymbol{\beta}) \,\pi_2(\delta) \tag{9}$$

Consideramos $\beta_i \sim N(0, 10^2)$ para $j = 1, ..., p y \delta \sim U(-2, 2)$.

consecuentemente, la fdp a posteriori es de la forma

$$\pi(\boldsymbol{\beta}, \delta \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{X}) \propto L(\boldsymbol{\beta}, \delta \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{X}) \pi(\boldsymbol{\beta}) \pi(\delta)$$
 (10)

$$\pi(oldsymbol{eta}, \delta \mid oldsymbol{y}, oldsymbol{X}) \propto \prod_{i=1}^{n} \left[F_{\delta} \left(oldsymbol{x_i}^T oldsymbol{eta}
ight)
ight]^{y_i} \left[1 - F_{\delta} \left(oldsymbol{x_i}^T oldsymbol{eta}
ight)
ight]^{1-y_i} \prod_{j=1}^{p} \exp \left\{ - rac{eta_j^2}{2(10^2)}
ight\}$$

consecuentemente, la fdp a posteriori es de la forma

$$\pi(\boldsymbol{\beta}, \delta \mid \mathbf{y}, \mathbf{X}) \propto L(\boldsymbol{\beta}, \delta \mid \mathbf{y}, \mathbf{X}) \pi(\boldsymbol{\beta}) \pi(\delta)$$
 (10)

$$\pi(\boldsymbol{\beta}, \delta \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{X}) \propto \prod_{i=1}^{n} \left[F_{\delta} \left(\boldsymbol{x}_{i}^{T} \boldsymbol{\beta} \right) \right]^{y_{i}} \left[1 - F_{\delta} \left(\boldsymbol{x}_{i}^{T} \boldsymbol{\beta} \right) \right]^{1-y_{i}} \prod_{j=1}^{p} \exp \left\{ -\frac{\beta_{j}^{2}}{2(10^{2})} \right\}$$

Una forma de hacer muestreo de esta distribución es a través de MCMC y en Python se puede usar a través del paquete Pystan el algoritmo No-U-Turn Sampler de Monte Carlo Hamiltoniano (HMC).





- Instalación de Anaconda



https://www.anaconda.com/download/

- Instalación de Anaconda



https://www.anaconda.com/download/

- Instalación de package Pystan conda install -c conda-forge pystan

- Instalación de Anaconda



https://www.anaconda.com/download/

- Instalación de package Pystan conda install -c conda-forge pystan
- Code

```
import numpy as np
import pandas as pd
import pystan
dat = pd.read_csv('data.csv')
data frame = dict(dat)
```

5. Implementación en Python

- Instalación de Anaconda



https://www.anaconda.com/download/

- Instalación de package Pystan conda install -c conda-forge pystan
- Code

```
import numpy as np
import pandas as pd
import pystan
dat = pd.read_csv('data.csv')
data frame = dict(dat)
```

```
data = \{\}
data['v'] = Y
data['X'] = X
data['k'] = data['X'].shape[1]
data['n'] = data['X'].shape[0]
```

5. Implementación en Python

```
model_code = """
 1
     dataf
       int < lower = 0 > k:
       int < lower = 0 > n;
 4
       int < lower = 0, upper = 1 > y[n];
 6
       matrix[n,k] X;
 8
     parameters {
 9
       vector[k] beta;
10
       real loglambda:
11
12
     transformed parameters {
13
       real lambda;
       vector[n] p;
14
15
       vector[n] prob;
16
       lambda = exp(loglambda);
17
       for (i in 1:n) f
18
       prob[i] = pow(logistic\_cdf(X[i]*beta, 0, 1), lambda);
19
20
21
     model f
22
       beta ~ normal(0.0,100);
23
       loglambda ~ uniform(-2,2);
       y ~ bernoulli(prob);
24
25
```

```
npar=data['k']
    #Modelo Power logistica
    chains = 1
    iter = 4000
    warmup = 2000
    thin = 2
    seed = 11113
                      #151141
    mod_l = pystan.StanModel(file="model_code")
    fit_1 = mod_1.sampling(
10
        data=data,
11
        chains=chains.
12
      iter=iter.
13
        warmup=warmup,
14
        thin=thin.
        seed=seed)
15
16
    #summary
    s_1 = fit_1.summary()
17
```

Fue analizado datos relacionados a la calidad del vino, relacionado a 11 atributos químicos, aquí, considerados como covariables:

Fue analizado datos relacionados a la calidad del vino, relacionado a 11 atributos químicos, aquí, considerados como covariables: acidez fija, acidez volátil, ácido cítrico, azúcar residual, cloruros, dióxido de azufre libre, dióxido de azufre total, densidad, pH, sulfatos e alcohol.

Fue analizado datos relacionados a la calidad del vino, relacionado a 11 atributos químicos, aquí, considerados como covariables: acidez fija, acidez volátil, ácido cítrico, azúcar residual, cloruros, dióxido de azufre libre, dióxido de azufre total, densidad, pH, sulfatos e alcohol.

Los datos contienen un total de 4898 observaciones (Ajuste=3429, validación=1469). La calidad de vino varia de cero (muy mala) a 10 (excelente), i.e., $Z = \{0, ..., 10\}$. Nos interesa calidad de vino superior a 6.

La proporción de unos fue de 20%, consecuentemente son dados desbalanceados.

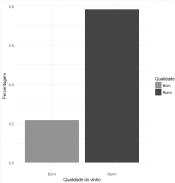


Figura 3: Calidad de vino

La proporción de unos fue de 20%, consecuentemente son dados desbalanceados.

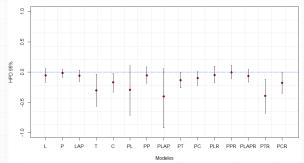


Figura 4: Intervalo HPD 95% para el coeficiente asociado a $di\acute{o}xido$ de $enxofre\ total$

Los códigos para todos los modelos fueron implementados en el lenguaje de Stan a través de Python usando Pystan (TEAM, 2017).

Los códigos para todos los modelos fueron implementados en el lenguaje de Stan a través de Python usando Pystan (TEAM, 2017).

La comparación de los modelos son realizadas usando los criterios DIC, EAIC, EBIC, WAIC y LOO. (GELMAN; HWANG; VEHTARI, 2014)

Modelo	DIC	EAIC	EBIC	IC	WAIC	LOO
Logística	4192.66	4204.99	4276.46	4202.32	4193.11	4198.49
Normal	4194.11	4205.73	4277.19	4204.49	4193.76	4193.73
Laplace	4197.72	4208.58	4280.05	4208.85	4197.54	4197.52
Cauchy	4217.10	4230.19	4301.65	4226.01	4218.80	4218.79
P-Logística	4221.42	4209.47	4280.93	4255.37	4201.16	4201.32
P-Normal	4190.28	4203.77	4275.23	4198.80	4191.58	4191.57
P-Laplace	4237.96	4227.21	4298.68	4270.70	4221.20	4221.62
P-Cauchy	4184.29	4194.52	4265.98	4196.06	4183.86	4183.84
RP-Logística	4195.76	4202.89	4274.35	4210.64	4192.84	4192.83
RP-Normal	4199.95	4209.80	4281.26	4212.10	4198.38	4190.38
RP-Laplace	4187.14	4197.600	4269.062	4198.689	4186.84	4186.82
RP-Cauchy	4180.83	4191.67	4263.13	4191.99	4181.40	4181.38

Tabela 2: Criterios de comparación de modelos para dados de calidad de vino.



Tabela 3: Estimación de los parámetros con el modelo RP-Cauchy para datos de calidad de vino

Atributo	Parâmetro	Estimativa	Desvio padrão	HPD (05%)
Intercepto	β_1	-0.895	0.161	(-1.202,	-0.579)
Acidez fija	β_2	0.381	0.080	(0.228,	0.534)
Acidez volátil	β_3	-0.306	0.050	(-0.397,	-0.207)
Azúcar residual	β_4	1.110	0.185	(0.746,	1.470)
Cloruros	β_5	-0.533	0.103	(-0.734,	-0.342)
Dióxido de azufre libre	β_6	0.170	0.049	(0.077,	0.264)
Densidad	β_7	-1.524	0.293	(-2.126,	-0.980)
pH	β_8	0.496	0.078	(0.350,	0.656)
Sulfatos	β_9	0.221	0.044	(0.142,	0.314)
Alcohol	β_{10}	0.339	0.126	(0.114,	0.606)
Parâmetro de assim.	λ	1.729	0.100	(1.536,	1.926)

Además consideramos la comparación de algunas medidas predictivas (FAWCETT, 2006)

Tabela 4: Medidas predictivas para regresión binaria con enlace Logit e potencia Cauchy

Modelo	Valor		Observado		ACC	TDD	TNR	ATIC	CCT
Modelo			0	1	ACC	IPK	INK	AUC	CSI
Logístico	Previsto	0	1086	268	0.774	0.160	0.944	0.79	0.042
		1	64	51					
R-potencia Cauchy	Previsto	Duarieta 0	1168	170	0.855	0.341	0.964	0.81	0.068
Cauchy		1	43	88					

ACC: Acuracia, TPR: Sensibilidad, TNR: Especificidad, AUC: Área debajo de la curva ROC, CSI: critical success index

$$ACC = \frac{VP + VN}{VP + FP + VN + FN}, \ TPR = \frac{VP}{VP + FN}, \ TNR = \frac{VN}{VN + FP}$$

$$CSI = \frac{VP}{VP + FP + FN}$$

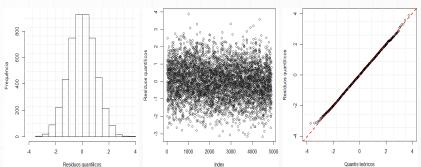


Figura 5: Residuos cuantílicos para a regresión binaria reversa de potencia Cauchy para calidad de vino



Portanto o modelo final escolhido tem a seguinte forma:

$$Y_i \sim \text{Bernoulli}(\hat{u}_i) \quad \forall i = 1, ..., 4898$$

$$\hat{u}_i = 1 - \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\arctan\left(-\hat{\eta}_i\right)\right]^{1.73}$$

em que

$$\begin{split} \hat{\eta}_i &= -0.895 + 0.38x_2 - 0.31x_3 + 1.11x_4 - 0.53x_5 + 0.17x_6 - 1.52x_7 + 0.50x_8 + 0.22x_9 + 0.34x_{10} \\ x_2 &= \text{acidez fija}, \ x_3 = \text{acidez volátil}, \ x_4 = \text{azúcar residual}, \ x_5 = \text{cloruros}, \ x_6 = \text{dióxido} \\ \text{de azufre libre}, \ x_7 = \text{densidad}, \ x_8 = \text{pH}, \ x_9 = \text{Sulfatos e} \ x_{10} = \text{alcohol} \end{split}$$

- Los modelos estadísticos binarios potencia y reversa de potencia para datos desbalanceados, es una alternativa para problemas de clasificación.
- En la aplicación se mostró que los modelos usuales incluso la regresión logística no muestran un buen desempeño cuando los datos son desbalanceados. En este caso, el modelo reversa de potencia Cauchy presentó el mejor ajuste.
- Una ventaja de utilizar este tipo de modelos es la fácil interpretación de los parámetros asociados a los atributos o covariables.



7. Principales referencias

FAWCETT, T. An introduction to roc analysis. Pattern recognition letters, Elsevier, v. 27, n. 8, p. 861–874, 2006.

GELMAN, A.; HWANG, J.; VEHTARI, A. Understanding predictive information criteria for bayesian models. *Statistics and Computing*, Kluwer Academic Publishers, Hingham, MA, USA, v. 24, n. 6, p. 997–1016, nov. 2014. ISSN 0960-3174. Disponível em: \http://dx.doi.org/10.1007/s11222-013-9416-2\rangle.

LEMONTE, A. J.; BAZÁN, J. L. New links for binary regression: an application to coca cultivation in peru. *TEST*, Sep 2017. ISSN 1863-8260. Disponível em: (https://doi.org/10.1007/s11749-017-0563-1).

MCCULLAGH, P.; NELDER, J. Generalized Linear Models, Second Edition. [S.l.]: Taylor & Francis, 1989. (Chapman & Hall/CRC Monographs on Statistics & Applied Probability). ISBN 9780412317606.

TEAM, S. D. PyStan: the Python interface to Stan, Version 2.16.0.0. 2017. Disponível em: (http://mc-stan.org).