Regressão linear múltipla bayesiana: *girl put your bayesian hat on*

Motivação

Como vimos até aqui, o modelo linear (gaussiano) é extremamente útil para modelar a relação entre possíveis variáveis explanatórias (i.e. covariáveis) e uma variável dependente/resposta contínua. Até agora vimos como fazer inferência para esse modelo sob a ótica clássica/frequentista. Vamos então nos debruçar sobre o tratamento bayesiano do problema.

O modelo

Vamos trabalhar com o mesmo modelo de antes:

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim \text{Normal}(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I}).$$

Vamos suplementar a estrutura condicional dos dados com uma estrutura probabilística para as quantidades desconhecidas do modelo, isto é, uma distribuição *a priori* $\pi_{B,S}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$.

Uma análise bayesiana não cojugada

Vamos mostrar agora uma análise do conjunto de dados 'kid score' usando o pacote **rstanarm**, que não utiliza prioris conjugadas (ver exercícios abaixo para a análise conjugada). Vamos preparar as coisas

```
library(ggplot2)
library(bayesplot)
theme_set(theme_bw())
library(rstanarm)
data(kidiq)
```

e agora ajustar o modelo que desenvolvemos na lição anterior (i.e. com interação) usando mínimos quadrados/máxima verossimilhança.

```r
fmod <- glm(kid_score ~ mom_hs * mom_iq, data = kidiq)
summary(fmod)
```

```

Call:
glm(formula = kid_score ~ mom_hs * mom_iq, data = kidiq)

Deviance Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-52.092  -11.332    2.066   11.663   43.880

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)   -11.4820    13.7580  -0.835 0.404422
mom_hs         51.2682    15.3376   3.343 0.000902 ***
mom_iq          0.9689     0.1483   6.531 1.84e-10 ***
mom_hs:mom_iq  -0.4843     0.1622  -2.985 0.002994 **
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

(Dispersion parameter for gaussian family taken to be 322.9736)

    Null deviance: 180386  on 433  degrees of freedom
Residual deviance: 138879  on 430  degrees of freedom
AIC: 3745.1

Number of Fisher Scoring iterations: 2
```

Em seguida, vamos ajustar o seguinte modelo

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},\\
\boldsymbol{\varepsilon} &\sim \text{Normal}(\boldsymbol{0}, \sigma^2\boldsymbol{I}),\\
\boldsymbol{\beta} &\sim \text{Normal}(\boldsymbol{0}, \text{diag}(25/4)),\\
\sigma &\sim \text{Exponencial}(1).
\end{aligned}
$$

que corresponde às prioris *default* do **rstanarm**. Note que a priori é sobre σ e não σ^2 – uma boa ideia é derivar a densidade sobre a variância dos erros. A ideia por trás desta especificação *a priori* é ter prioris *fracamente informativas* (*weakly informative*); em particular, a ideia é dizer que os coeficientes são independentes *a priori* e têm desvio padrõa de 2.5, permitindo a estimação de efeitos razoavelmente grandes. Além disso, a priori sobre o erro de observação (σ^2) encoraja fortemente pequenos erros – tem muita massa perto de zero.

Vamos agora ajustar o modelo usando a função `stan_glm` que utiliza um algoritmo de cadeias de Markov Monte Carlo (MCMC) chamado Hamiltonian Monte Carlo para obter amostras aproximadas da *posteriori* $p_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mid \boldsymbol{y}) \propto f_{\boldsymbol{X}}(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{\beta}, \sigma^2)\pi_{B,S}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$:

```
bmod <- stan_glm(kid_score ~ mom_hs * mom_iq,
                     data = kidiq, refresh = 0)
summary(bmod)
```

```
Model Info:
 function:     stan_glm
 family:       gaussian [identity]
 formula:      kid_score ~ mom_hs * mom_iq
 algorithm:    sampling
 sample:       4000 (posterior sample size)
 priors:       see help('prior_summary')
 observations: 434
 predictors:   4

Estimates:
                mean   sd    10%   50%   90%
(Intercept)   -10.3   13.7 -28.0 -10.4   7.5
mom_hs         50.0   15.4  30.1  49.8  69.8
mom_iq          1.0    0.1   0.8   1.0   1.1
mom_hs:mom_iq  -0.5    0.2  -0.7  -0.5  -0.3
sigma          18.0    0.6  17.3  18.0  18.8

Fit Diagnostics:
           mean   sd   10%   50%   90%
mean_PPD 86.8    1.2 85.2  86.8  88.4

The mean_ppd is the sample average posterior predictive distribution of the outcome variable

MCMC diagnostics
              mcse Rhat n_eff
(Intercept)   0.4  1.0  1507
mom_hs        0.4  1.0  1399
mom_iq        0.0  1.0  1527
mom_hs:mom_iq 0.0  1.0  1412
sigma         0.0  1.0  2605
```

```
mean_PPD      0.0  1.0  3097
log-posterior 0.0  1.0  1543

For each parameter, mcse is Monte Carlo standard error, n_eff is a crude measure of effective
```

Depois de checar os diagnósticos do MCMC (Rhat < 1.01 e ESS > 500 para todos os parâmetros), vemos que as estimativas dos coeficientes não são radicalmente diferentes daquelas obtidas com o método clássico/frequentista. Isso não chega a ser surpresa porque temos uma quantidade razoável de observações ($n = 434$) em relação ao número de parâmetros (quantos são?).

Interrogando o modelo usando predições *a posteriori*

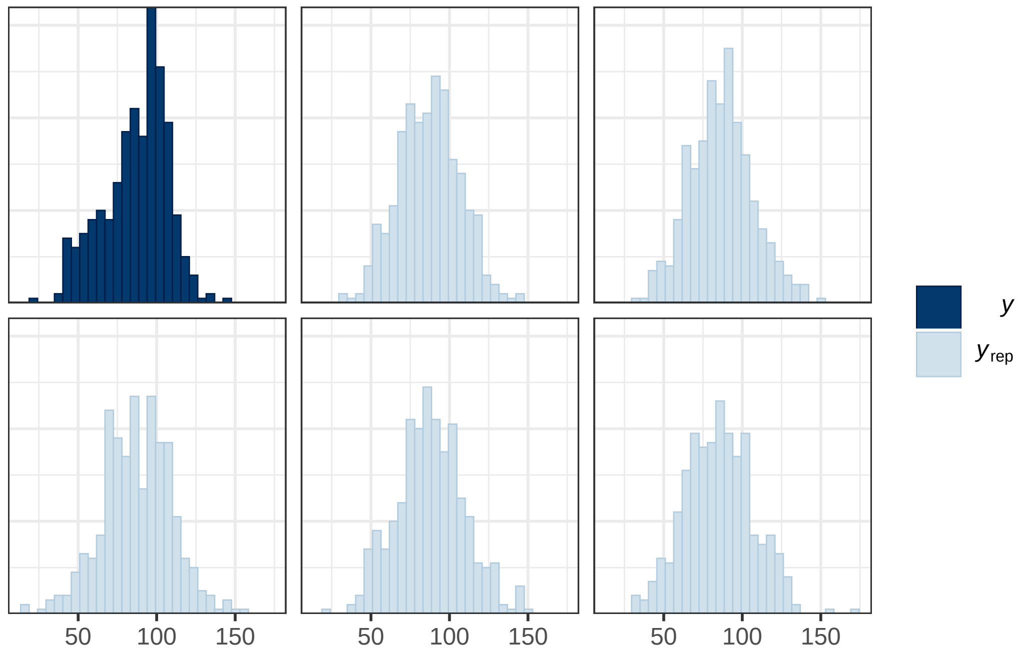
Agora que temos uma distribuição *a posteriori* para as quantidades desconhecidas do modelo, vamos utilizá-la para explorar o modelo e analisar o seu ajuste aos dados. Vamos computar a distribuição preditiva *a posteriori* de certas quantidades e comparar essas distribuições com os valores observados nos dados. Chamamos esse procedimento genérico de checagem preditiva *a posteriori* (em inglês, *posterior predictive checks* [PPC]). Vamos começar com densidade da variável dependente,

$$\tilde{p}_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{y}) = \int_{\boldsymbol{\Omega}} f_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \theta) p_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{\theta} \mid \boldsymbol{y})\, d\boldsymbol{\theta},$$

para $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)$ e uma (potencialmente nova) matriz de desenho $\tilde{\boldsymbol{X}}$. Um bom exercício é escrever a integral acima como uma marginalização sobre a distribuição conjunta de $\tilde{\boldsymbol{y}}$ e as outras quantidades desconhecidas do modelo e entender que essa manipulação segue diretamente as regras do cálculo de probabilidades. Vamos olhar $\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{\theta}$ para cinco amostras da posteriori

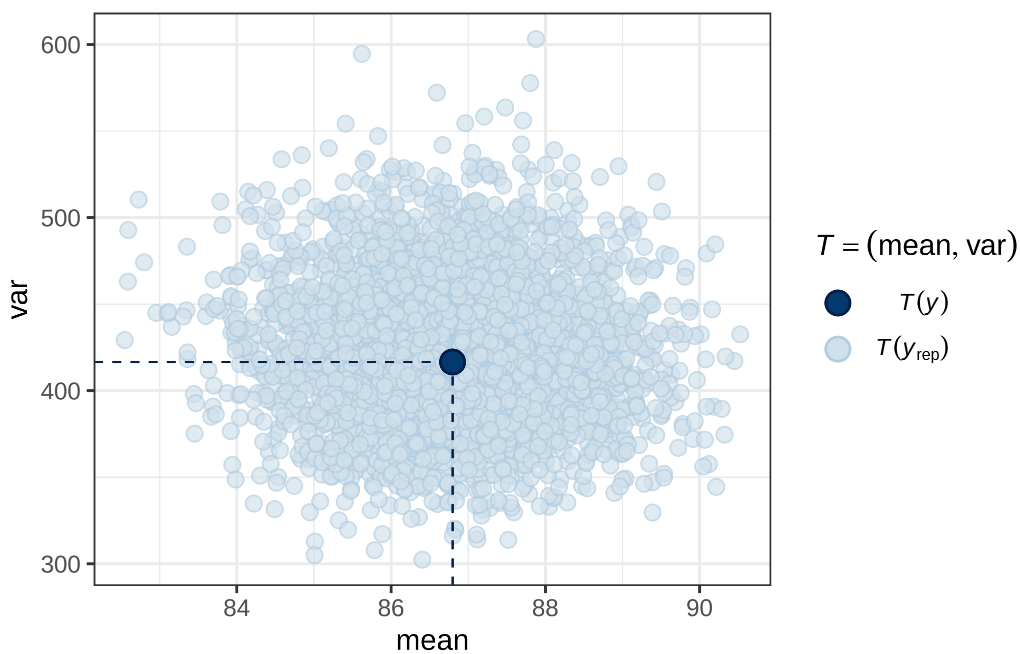
```r
pp_check(bmod, plotfun = "hist", nreps = 5)
```

```
`stat_bin()` using `bins = 30`. Pick better value with `binwidth`.
```



Uma aproximação de $\tilde{p}(\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{y})$ pode ser obtida tomando uma média sobre muitas amostras. Agora vamos olhar a distribuição conjunta de $\mu_{\tilde{\boldsymbol{X}},\boldsymbol{y}} := E\left[\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\theta}\right]$ e $v_{\tilde{\boldsymbol{X}},\boldsymbol{y}} := \mathrm{Var}(\tilde{\boldsymbol{y}} \mid \boldsymbol{y}, \boldsymbol{\theta})$:

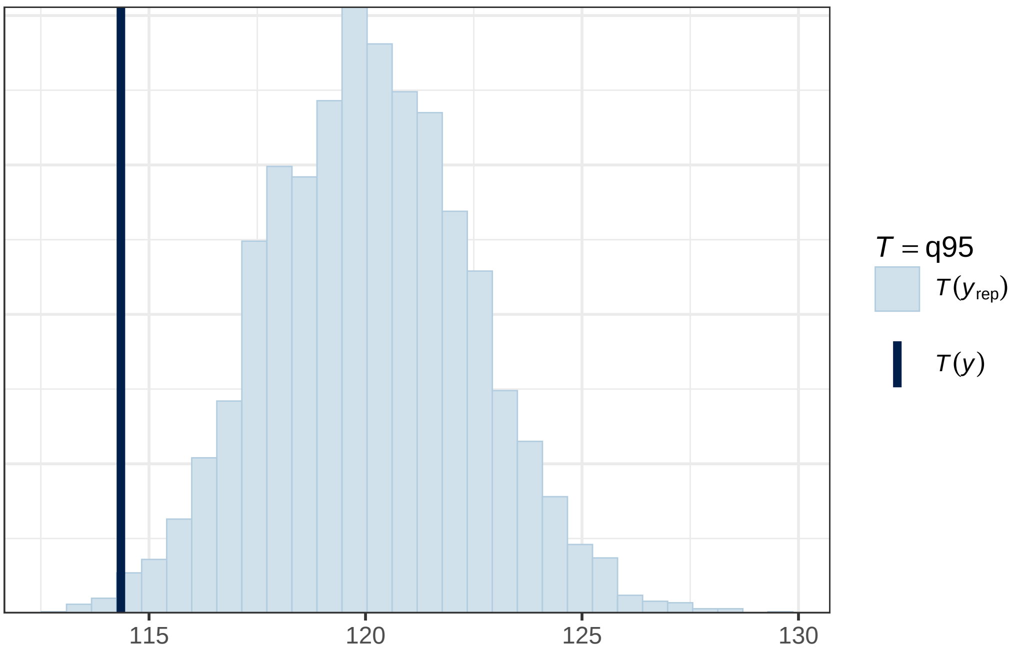
```
pp_check(bmod, plotfun = "stat_2d", stat = c("mean", "var"))
```



Onde vemos que o modelo parece produzir dados que têm os dois primeiros momentos bem parecidos com os observados. Por último, vamos estudar a capacidade do modelo de modelar a cauda da distribuição de $\boldsymbol{y}$:

```
q95 <- function(x) quantile(x, .95)
pp_check(bmod, plotfun = "stat", stat = "q95")
```

```
`stat_bin()` using `bins = 30`. Pick better value with `binwidth`.
```

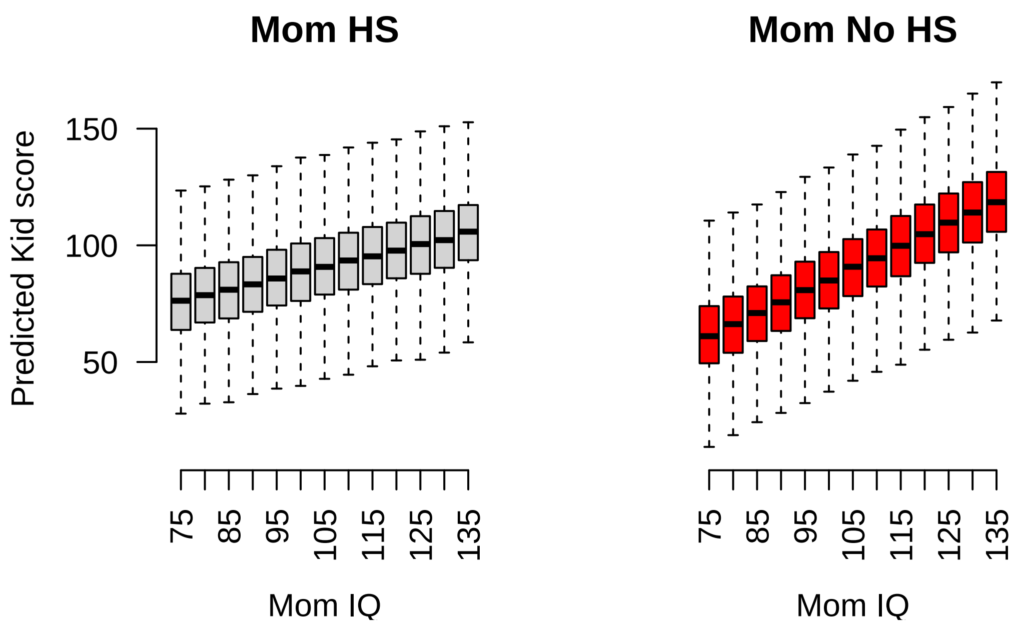


Vemos que no que toca à modelagem do quantil 95%, nosso modelo não faz um ótimo trabalho. E tudo bem. Em um modelo de regressão linear, estamos interessados em modelar bem a média condicional e a variância dos dados. Porque será que a cauda da distribuição preditiva parece ser mais pesada que a cauda dos dados observados? Será que você consegue responder usando os resultados da análise conjugada?

Para terminar, vamos produzir predições da variável dependente para vários valores do QI da mãe (`mom_iq`) para os dois grupos (`mom_hs =0` e `mom_hs=1`):

```
IQ_SEQ <- seq(from = 75, to = 135, by = 5)
y_nohs <- posterior_predict(bmod, newdata = data.frame(mom_hs = 0, mom_iq = IQ_SEQ))
y_hs <- posterior_predict(bmod, newdata = data.frame(mom_hs = 1, mom_iq = IQ_SEQ))
```

```r
par(mfrow = c(1:2), mar = c(5,4,2,1))
boxplot(y_hs, axes = FALSE, outline = FALSE, ylim = c(10,170),
        xlab = "Mom IQ", ylab = "Predicted Kid score", main = "Mom HS")
axis(1, at = 1:ncol(y_hs), labels = IQ_SEQ, las = 3)
axis(2, las = 1)
boxplot(y_nohs, outline = FALSE, col = "red", axes = FALSE, ylim = c(10,170),
        xlab = "Mom IQ", ylab = NULL, main = "Mom No HS")
axis(1, at = 1:ncol(y_hs), labels = IQ_SEQ, las = 3)
```



Isto é, aqui nós construímos duas $\tilde{\boldsymbol{X}}$ diferentes e amostramos (aproximadamente) de $\tilde{p}_{\tilde{\boldsymbol{X}}}$ para produzir as nossas predições. Note que essas predições já levam em conta a incerteza sobre os parâmetros (veja exercício 5 abaixo).

Exercícios de fixação

Considere o modelo discutido acima. Uma escolha interessante para auxiliar no entendimento e na análise é

$$\pi_{B,S}(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) = \pi_{B|S}(\boldsymbol{\beta} \mid \sigma^2)\pi_S(\sigma^2),$$

isto é, uma estrutura *a priori* que modela os coeficientes de forma condicional à variância dos erros e uma distribuição marginal na variância. As consequências matemáticas dessas escolhas são bem discutidas aqui e aqui – mas você deve tentar deduzir os resultados de forma independente primeiro.

1. Mostre que a verossimilhança $f_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y} \mid \theta)$ pode ser escrita na forma

$$f_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y} \mid \theta) = g_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) h_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y}|\sigma^2).$$

2. Utilize o resultado anterior para deduzir que a priori conjugada para este caso é da forma

$$\pi_{B,S}\left(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\right) = \pi_{B|S}\left(\boldsymbol{\beta} \mid \sigma^2\right) \pi_S(\sigma^2).$$

   Em particular, mostre que

$$\pi_{B,S}\left(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\right) \propto \left(\frac{1}{\sigma^2}\right)^{a+(P+1)/2+1} \times \quad \exp\left(-\frac{1}{\sigma^2}\left\{b + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\mu}_\beta)^T \boldsymbol{V}_\beta^{-1}(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\mu}_\beta)\right\}\right),$$

   onde $\boldsymbol{\mu}_\beta \in \mathbb{R}^{P+1}$, $\boldsymbol{V}_\beta$ é uma matriz positiva definida e $a, b \in \mathbb{R}_+$.

Dica: Que escolhas para $\pi_{B|S}$ e π_S eu preciso fazer?

3. A priori anterior chama-se **normal inversa gama** (NIG) e tem quatro parâmetros: $\boldsymbol{m}$, $\boldsymbol{V}$, a e b. Mostre que a posteriori de θ também é NIG e exiba seus hiperparâmetros.

4. **Distribuições marginais:** um objeto muito importante em qualquer análise bayesiana é a distribuição marginal de cada parâmetro, porque ela permite inferências mais interpretáveis ao mesmo tempo que acomoda a incerteza sobre as outras quantidades desconhecidas do modelo. Vamos agora calcular algumas marginais importantes.

Dica: Antes de começar os cálculos para essa seção, vale considerar a seguinte representação do nosso modelo:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{y} &= \tilde{\boldsymbol{X}}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}_1, \text{ com } \boldsymbol{\epsilon}_1 \sim \mathrm{MVN}_n\left(\boldsymbol{0}_n, \boldsymbol{\Sigma_1}\right), \\
\boldsymbol{\beta} &= \boldsymbol{\mu}_\beta + \boldsymbol{\epsilon}_2, \text{ com } \boldsymbol{\epsilon}_2 \sim \mathrm{MVN}_{P+1}\left(\boldsymbol{0}_{P+1}, \boldsymbol{\Sigma_2}\right),
\end{aligned}$$

onde $\boldsymbol{\epsilon}_1$ e $\boldsymbol{\epsilon}_2$ são erros independentes.

4.1 Determine $\boldsymbol{\Sigma}_1$ e $\boldsymbol{\Sigma}_2$;

4.2 Compute a verossimilhança marginal com respeito a σ^2:

$$\tilde{f}_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y} \mid \sigma^2) := \int_{\mathbb{R}^{P+1}} f_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y} \mid \boldsymbol{b}, \sigma^2) \pi_{B|S}(\boldsymbol{b} \mid \sigma^2)\, d\boldsymbol{b}.$$

4.3 Usando o item anterior, compute a verossimilhança marginal ou *preditiva a priori*:

$$m_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y}) := \int_0^\infty \tilde{f}_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{y} \mid s) \pi_S(s)\, ds.$$

4.4 Mostre $\bar{f}_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{\beta} \mid \boldsymbol{y})$ e comente sobre como calcular, por exemplo, $\Pr(\beta_1 > a \mid \boldsymbol{y})$, para $a \in \mathbb{R}$.

5. Suponha que eu coletei uma nova matriz de desenho $m \times P$, $\boldsymbol{X'}$ e quero prever o valor de $\boldsymbol{y'}$ a partir do que eu aprendi usando $\boldsymbol{X}$ e $\boldsymbol{y}$. Compute

$$\bar{p}_{\tilde{\boldsymbol{X}},\boldsymbol{X'}}(\boldsymbol{y'} \mid \boldsymbol{y}) := \int_{\mathbb{R}^{P+1}\times\mathbb{R}_+} p_{\tilde{\boldsymbol{X}}}(\boldsymbol{b}, s \mid \boldsymbol{y}) f_{\boldsymbol{X'}}(\boldsymbol{y'} \mid \boldsymbol{b}, s)\, d\boldsymbol{b}\, ds,$$

e esboce o seu gráfico para uma observação (linha de $\boldsymbol{X'}$) de um conjunto de dados da sua escolha. Compare essas predições com a execução da mesma tarefa sob o ponto de vista frequentista/clássico.

Dica: use um conjunto de dados que você conheça bem. Bons exemplos são os bancos de 'peso ao nascer' e 'kid score', que já analisamos em sala.

Resultados úteis

Aqui estão enunciados alguns resultados úteis para o desenvolvimento das questões acima. Estes resultados são dados sem demonstração, que você está convidada a fazer.

- **Completando o "quadrado" em múltiplas dimensões**: tome $\boldsymbol{A}$ matriz simétrica positiva definida $d \times d$ e $\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^d$. Vale que:

$$\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} - 2\boldsymbol{\alpha}^T\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{u} - \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{\alpha})^T\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{\alpha}) - \boldsymbol{\alpha}^T\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{\alpha}. \tag{1}$$

  Dica: Expanda o produto e procure por cancelamentos de termos da forma $\boldsymbol{a}^T\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{a}$.

- **Sherman-Woodbury-Morrisson**: tome $\boldsymbol{A}$ matriz quadrada $d \times d$ <u>inversível</u>, $\boldsymbol{B}$ matriz $k \times d$, $\boldsymbol{C}$ matriz $d \times k$ e $\boldsymbol{D}$ matriz quadrada $k \times k$ inversível. Então

$$(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{BDC})^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1} - \left(\boldsymbol{D}^{-1} + \boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\right)^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}.$$

- **Determinantes**: tome $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$ e $\boldsymbol{D}$ como antes. Então,

$$\det(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{BDC}) = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{D})\det\left(\boldsymbol{D}^{-1} + \boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\right).$$

Referências

- Banerjee, S. Bayesian Linear Model: Gory Details. Pubh7440 Notes.
- Gelman, A., Hill, J., & Vehtari, A. (2020). Regression and other stories. Cambridge University Press.