Байесовская линейная регрессия

Максим Кочуров

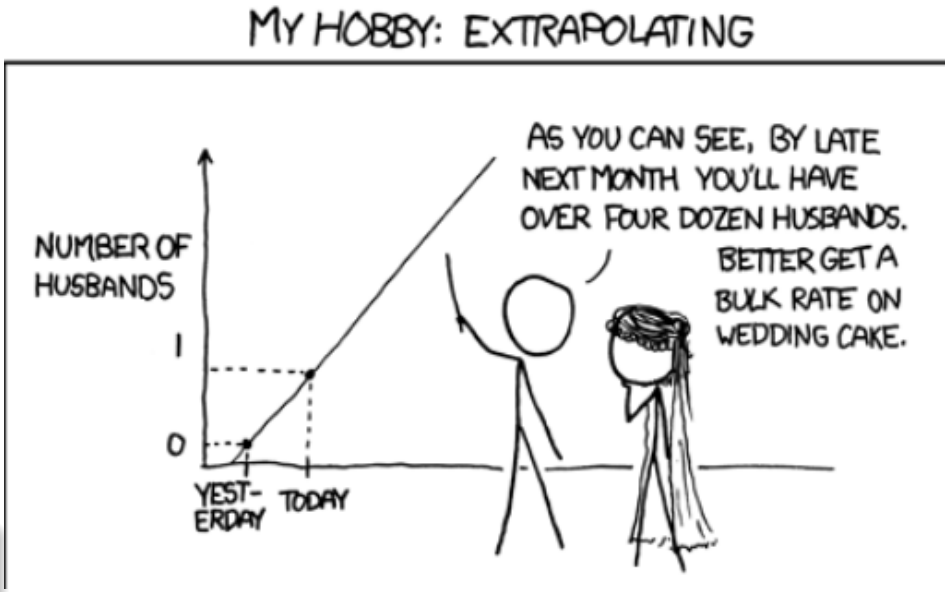
МГУ им. М.В. Ломоносова

Лекция 6

Содержание

Почему линейная регрессия – это база

- Применяется при принятии решений
  - Корреляция
  - Направление влияния
  - Оценка эффектов
- Основа более сложных моделей
  - Marketing Mix Models
  - AB тесты



Lego

Линейная регрессия – основа многих статистических методов

Вводим обозначения

В эконометрике общеприняты следующие обозначения

$$y \sim x_1 + x_2 + \cdots + x_k$$

Как читаем

Переменная y линейно зависит от x_1, x_2, ..., x_k

Вводим обозначения

В эконометрике общеприняты следующие обозначения

$$y \sim x_1 + x_2 + \cdots + x_k$$

Как читаем

Переменная y линейно зависит от x_1, x_2, ..., x_k

Также предполагаем (если не оговорено иное) наличие константы

$$y \sim 1 + x_1 + x_2 + \cdots + x_k$$

Вводим обозначения

В эконометрике общеприняты следующие обозначения

$$y \sim x_1 + x_2 + \cdots + x_k$$

Как читаем

Переменная y линейно зависит от x_1, x_2, ..., x_k

Также предполагаем (если не оговорено иное) наличие константы

$$y \sim 1 + x_1 + x_2 + \cdots + x_k$$

Основная задача – оценка вектора коэффициентов β

$$y \sim \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_k x_k$$

Нелинейные случаи

% изменение в x_1 приводит к % изменению y

$$\log y \sim \log x_1 + \ldots$$

Нелинейные случаи

% изменение в x_1 приводит к % изменению y

$$\log y \sim \log x_1 + \dots$$

% изменение в x_1 изменяет y на у.е.

$$y \sim \log x_1 + \dots$$

Нелинейные случаи

% изменение в x_1 приводит к % изменению y

$$\log y \sim \log x_1 + \dots$$

% изменение в x_1 изменяет y на у.е.

$$y \sim \log x_1 + \dots$$

изменение x_1 на у.е. приводит к % изменению в y

$$\log y \sim x_1 + \dots$$

Нелинейные случаи

% изменение в x_1 приводит к % изменению y

$$\log y \sim \log x_1 + \ldots$$

% изменение в x_1 изменяет y на у.е.

$$y \sim \log x_1 + \ldots$$

изменение x_1 на у.е. приводит к % изменению в y

$$\log y \sim x_1 + \ldots$$

Вывод

Интерпретация требует аккуратности в случае нелинейных связей

Обобщенные линейные модели: основы

Связать наблюдения можно с помощью произвольной функцией правдоподобия. Классический пример

$$c_i \sim \text{Binom}(p_i, n_i)$$
$$\text{link}^{-1}(p_i) \sim x_{1i} + x_{2i} + \cdots + x_{ki}$$

Гетероскедастичность

Добавим немного гибкости в модель

$$y_i \sim \mathcal{N}(m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \dots$$
$$\log s_i \sim z_i$$

Гетероскедастичность

Добавим немного гибкости в модель

$$y_i \sim \mathcal{N}(m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \dots$$
$$\log s_i \sim z_i$$

Заметка

Заметим, что s_i зависит от z_i. Такие модели требуют оптимизационных методов для оценки.

Другие функции правдоподобия

Можно добиться большей гибкости, изменив функцию правдоподобия и ослабив некоторые ограничения

$$y_i \sim \mathcal{T}(\nu_i, m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \dots$$
$$\log s_i \sim z_i + \dots$$
$$\log \nu_i \sim w_i + \dots$$

Другие функции правдоподобия

Можно добиться большей гибкости, изменив функцию правдоподобия и ослабив некоторые ограничения

$$y_i \sim \mathcal{T}(\nu_i, m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \dots$$
$$\log s_i \sim z_i + \dots$$
$$\log \nu_i \sim w_i + \dots$$

Заметка

Выше – модель на основе распределения Стьюдента с переменным числом степеней свободы. Её оценки очень зашумлены, если не использовать регуляризацию

Оценка модели

Из эконометрики знаем, что с помощью ММП получаем оценку

$$\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1} X^\top y$$

Оценка модели

Из эконометрики знаем, что с помощью ММП получаем оценку

$$\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1} X^\top y$$

1. А если какие-то коэффициенты точно положительны?
2. А если какие-то коэффициенты в β маленькие по величине?
3. А если какие-то переменные не имеют статзначимости?

Ограничение

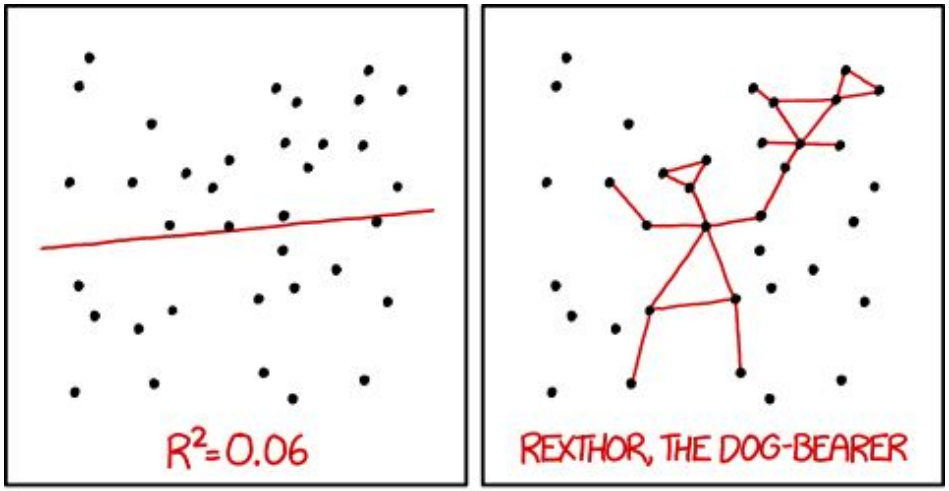
В частотной статистике нельзя никак применять имеющиеся знания

Априорные распределения

Байесовский подход предполагает наличие априорных распределений, но каких?

$$y_i \sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma)$$
$$\beta_j \sim ???$$
$$c \sim ???$$
$$\sigma \sim ???$$

Ранее ввели два параметра: β, σ



Выбираем распределения

В качестве априорного распределения возьмем нормальное распределение

$$
\begin{aligned}
y_i &\sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma) \\
\beta_j &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
c &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
\sigma &\sim \mathcal{N}_+(1) \qquad \text{// Half Normal}
\end{aligned}
$$

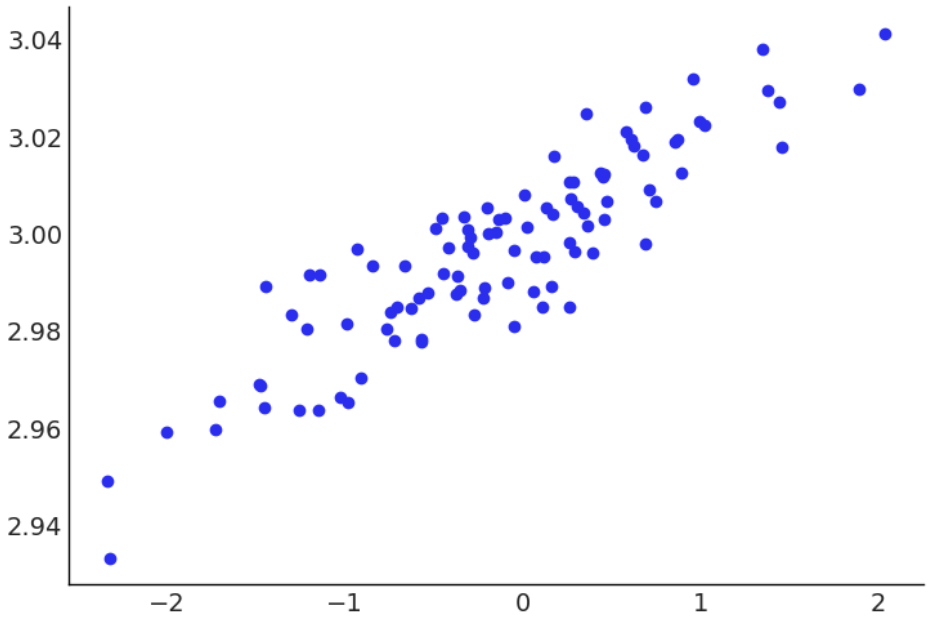


Рис.: Пример данных

Выбираем распределения

В качестве априорного распределения возьмем нормальное распределение

$$
\begin{aligned}
y_i &\sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma) \\
\beta_j &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
c &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
\sigma &\sim \mathcal{N}_+(1) \qquad \text{// Half Normal}
\end{aligned}
$$

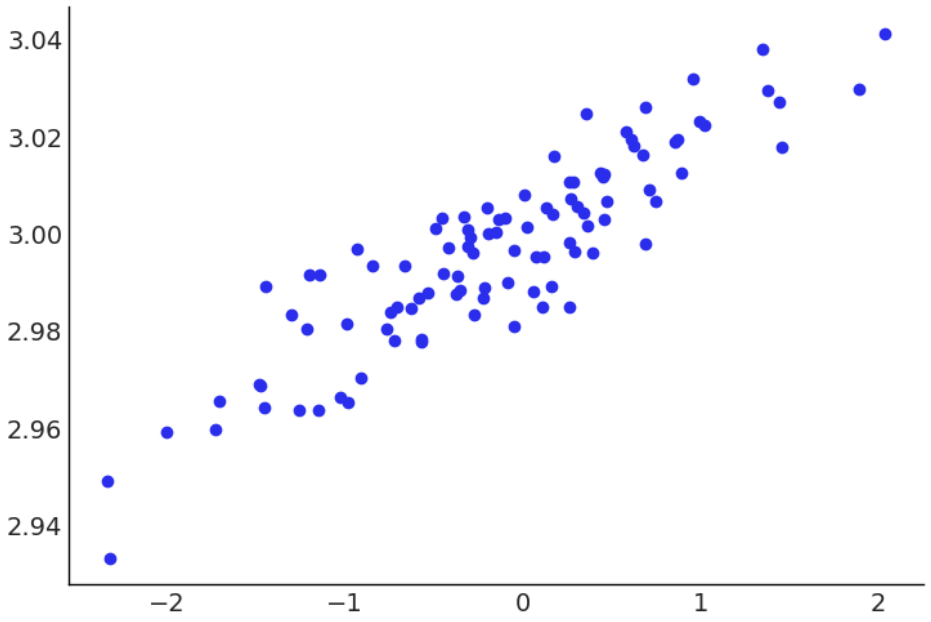


Рис.: Пример данных

Внимание

Базовые параметры для априорных β и σ могут приводить к непредсказуемым результатам

Выбираем распределения

Для подбора априорного – воспользуемся предиктивным распределением

$$
\begin{aligned}
y_i &\sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma) \\
\beta_j &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
c &\sim \mathcal{N}(0, 1) \\
\sigma &\sim \mathcal{N}_+(1) \qquad \text{// Half Normal}
\end{aligned}
$$

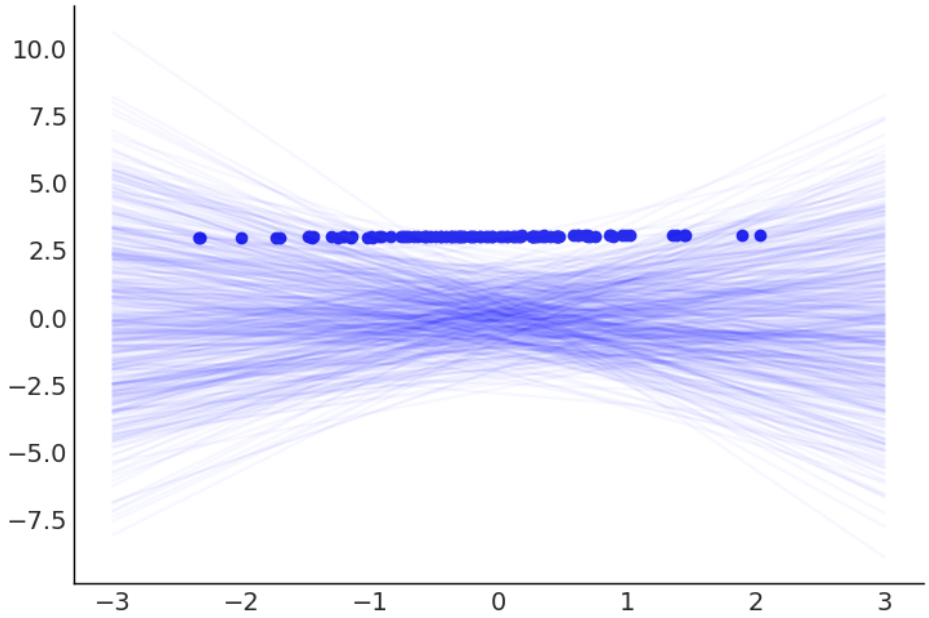


Рис.: Априорное предиктивное распределение

Внимание

Иногда априорное предиктивное распределение "съезжает", поэтому надо проверять визуализацию

Выбираем распределения

Для подбора априорного – воспользуемся предиктивным распределением

$$
\begin{aligned}
y_i &\sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma) \\
\beta_j &\sim \mathcal{N}(0, 100) \\
c &\sim \mathcal{N}(0, 100) \\
\sigma &\sim \mathcal{N}_+(1) \qquad \text{// Half Normal}
\end{aligned}
$$

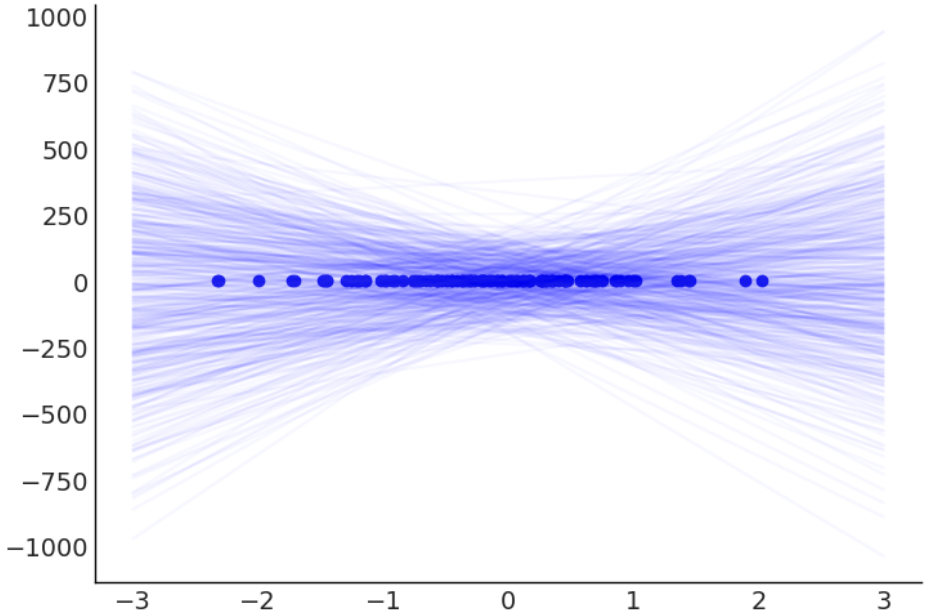


Рис.: Априорное предиктивное распределение

Внимание

Иногда априорное предиктивное распределение "съезжает", поэтому надо проверять визуализацию

Больше параметров – больше проблем

Предполагая априорно независимость объясняющих переменных, можно вычислить теоретическую дисперсию

$$y_i \sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma)$$

$$V[y_i] = \sum V[x_{ij}] * V[\beta_j]$$

Разница в значениях в случае $x_i \in R^3$ и в случае $x_i \in R^{100}$ велика

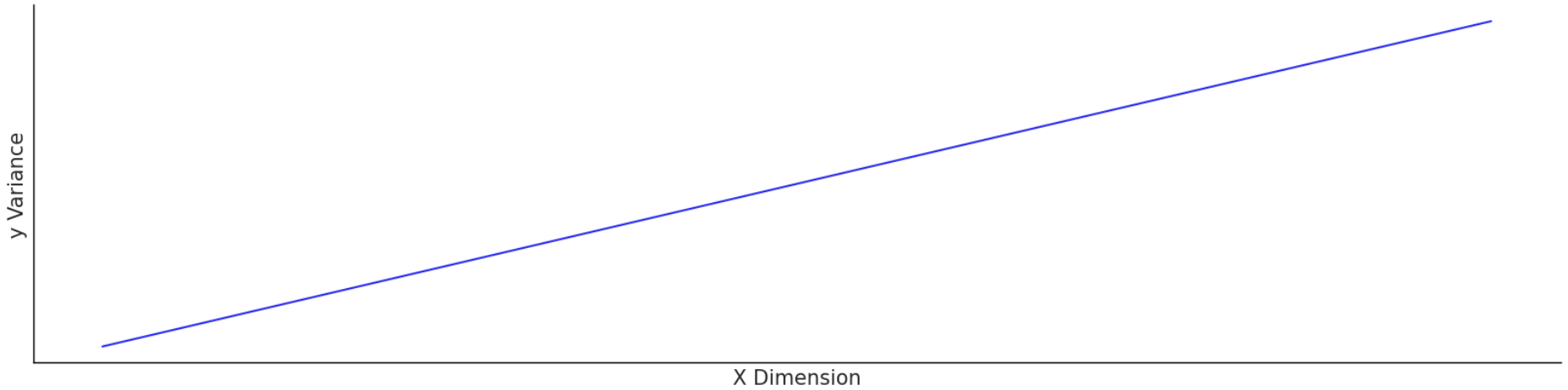


Рис.: Больше объясняющих переменных – больше дисперсия

Как это легко поправить

Простой способ убрать зависимость от числа регрессоров следующий

$$y_i \sim \mathcal{N}(c + \beta^\top x_i, \sigma)$$

$$\beta_j \sim \mathcal{N}(0, \frac{\sigma_\beta^2}{D})$$

$$\dots$$

Совет

Стандартизируйте данные: $a \mapsto \frac{a - \text{mean}(a)}{\text{std}(a)}$

Практический подход

Для начала – стандартизируем данные: $a \mapsto \frac{a - \text{mean}(a)}{\text{std}(a)}$

$$\bar{y}_i \sim \mathcal{N}(c + \bar{\beta}^\top \bar{x}_i, \sigma)$$
$$\bar{\beta} \sim \mathcal{N}(0, 1/D)$$
$$c \sim \mathcal{N}(0, 1)$$
$$\sigma \sim \mathcal{N}_+(1)$$

1. Дисперсия входных/выходных данных равна 1
2. Среднее входных/выходных данных равно 0
3. Почти всегда рабоает
4. Сложно подобрать априорное для σ

Практический подход

Для начала – стандартизируем данные: $a \mapsto \frac{a - \text{mean}(a)}{\text{std}(a)}$

$$\bar{y}_i \sim \mathcal{N}(c + \bar{\beta}^\top \bar{x}_i, \sigma)$$
$$\bar{\beta} \sim \mathcal{N}(0, 1/D)$$
$$c \sim \mathcal{N}(0, 1)$$
$$\sigma \sim \mathcal{N}_+(1)$$

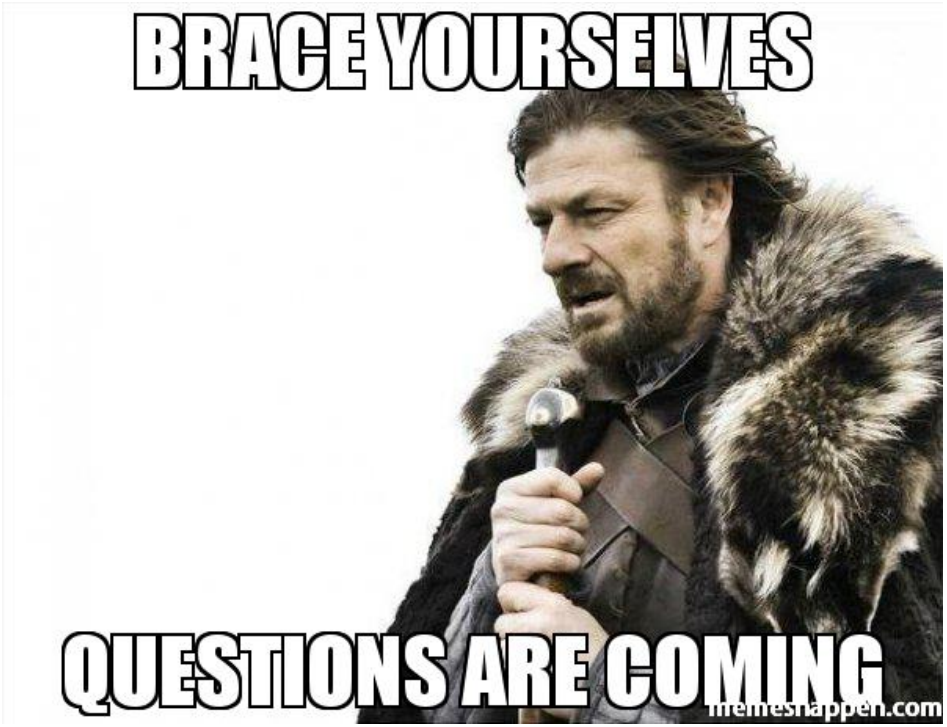
1. Дисперсия входных/выходных данных равна 1
2. Среднее входных/выходных данных равно 0
3. Почти всегда рабоает
4. Сложно подобрать априорное для σ

Восстановление исходных параметров

$$\beta_j = \frac{\bar{\beta}}{\text{std}(x_j)}$$

Мы знаем что мы знаем

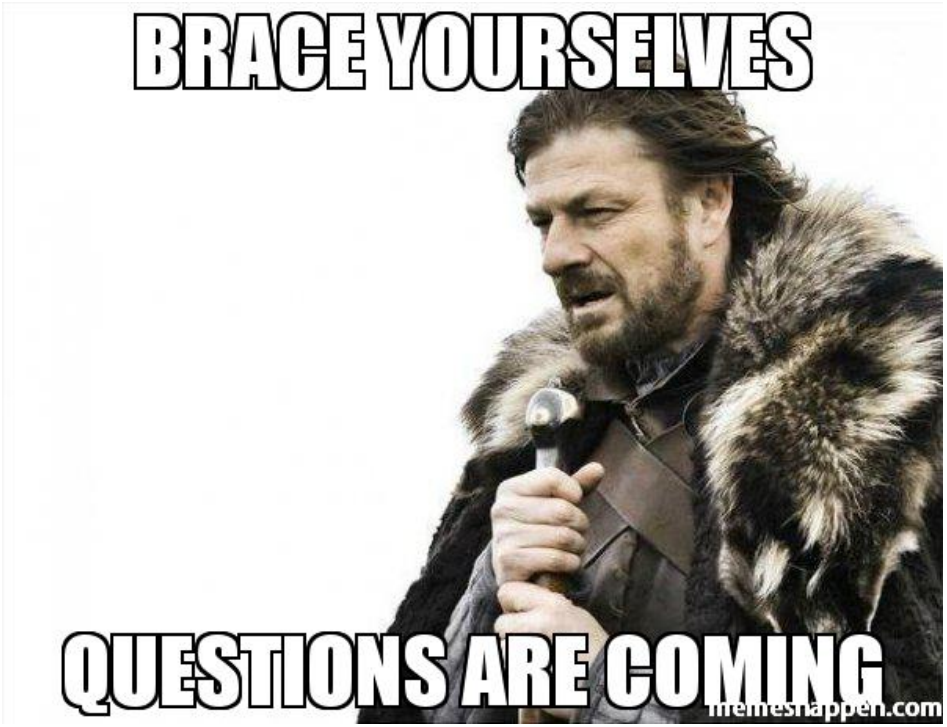
Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!



Мы знаем что мы знаем

Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!

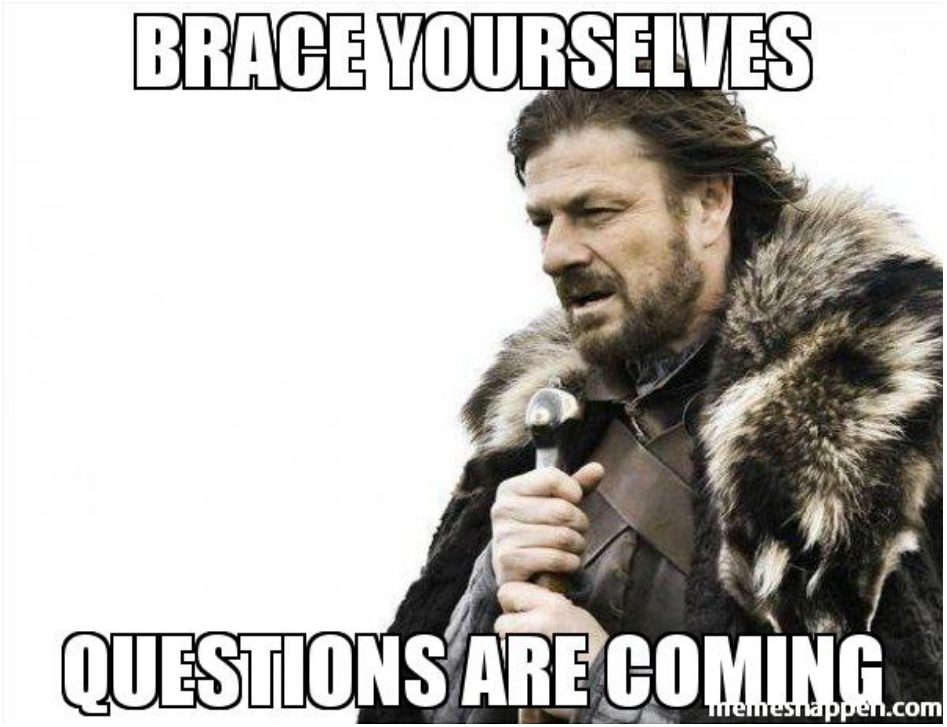
- B: Что мы знаем про линейную регрессию?



Мы знаем что мы знаем

Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!

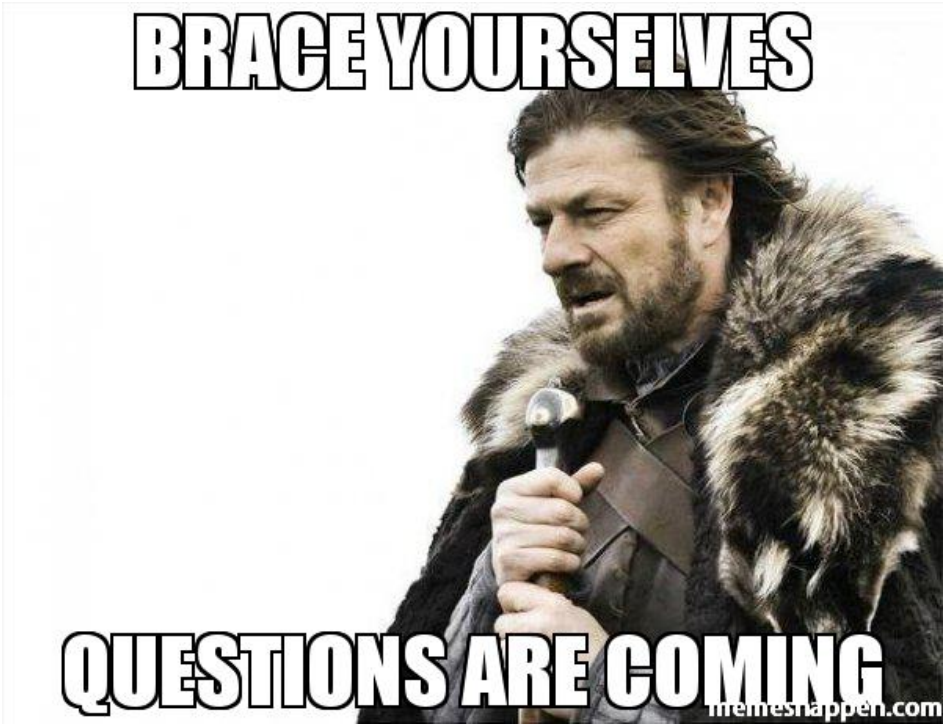
- В: Что мы знаем про линейную регрессию?
- О: R^2 для неё – метрика качества



Мы знаем что мы знаем

Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!

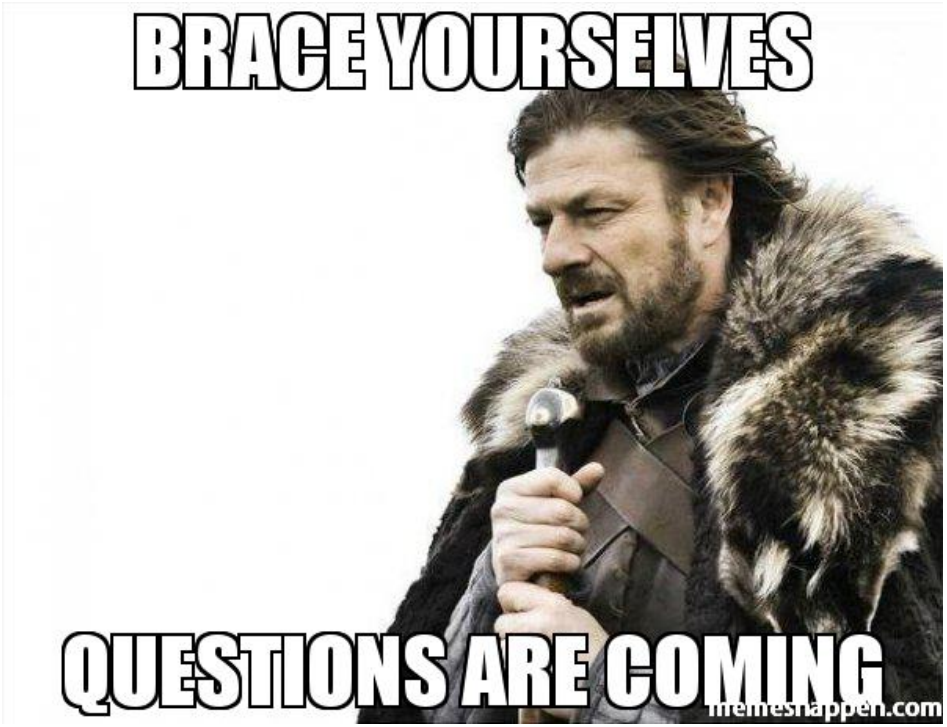
- В: Что мы знаем про линейную регрессию?
- О: R^2 для неё – метрика качества
- В: А еще?



Мы знаем что мы знаем

Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!

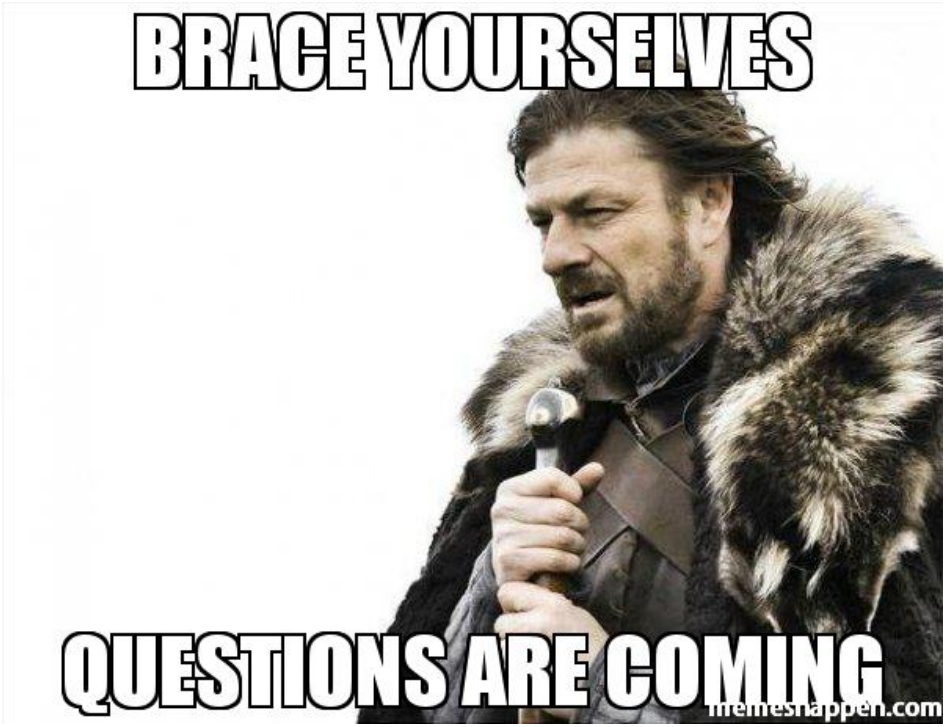
- В: Что мы знаем про линейную регрессию?
- О: R^2 для неё – метрика качества
- В: А еще?
- О: Какие-то переменные более важные



Мы знаем что мы знаем

Подбирать априорные – тяжело, как сделать проще? Задавать себе вопросы!

- В: Что мы знаем про линейную регрессию?
- О: R^2 для неё – метрика качества
- В: А еще?
- О: Какие-то переменные более важные
- О: Какие-то переменные имеют положительное влияние



Априорное для R^2

Как интерпретировать R^2?

1. Мера подгонки модели под данные
   - 0 - очень плохая подгонка
   - 1 - идеальная подгонка
2. При близких к 1 значениях – скорее всего, переобучение
3. R^2 - **доля объясненной дисперсии**

$$R^2 = 1 - \frac{\sigma_r^2}{\sigma_T^2}$$

$$FVU = \frac{\sigma_r^2}{\sigma_T^2}$$

- σ_r^2 - сумма квадратов остатков
- σ_T^2 - общая сумма квадратов
- FVU - **F**raction **V**ariance **U**nexplained

Настраиваем априорное для R^2

Предположения для R^2 можно сделать даже перед построением регрессий, зная как они получены.

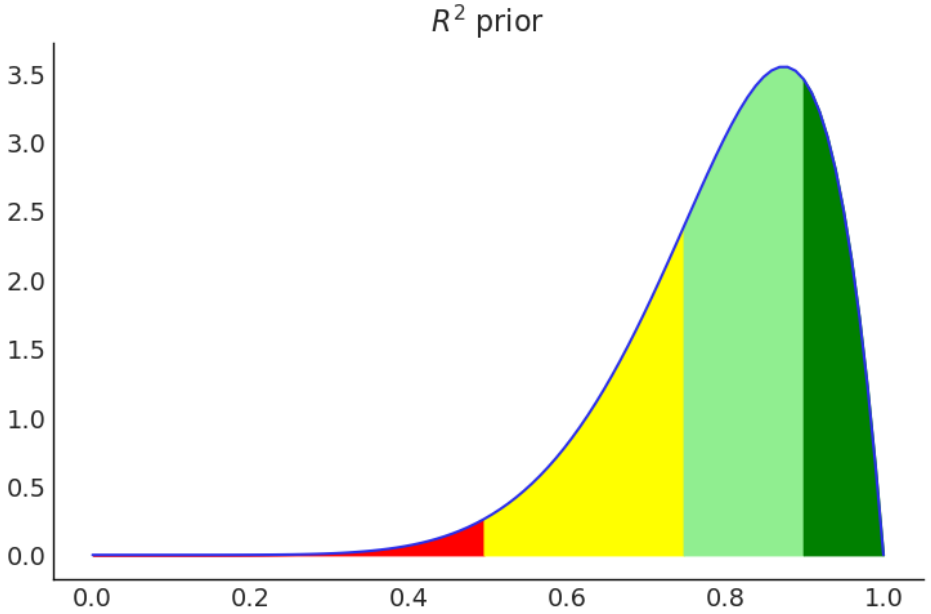
- $R^2 < 0.5$ – в поле, шум в данных
- $0.5 < R^2 < 0.75$ – в поле, хорошие данные
- $0.75 < R^2 < 0.90$ – в лаборатории, шум в данных
- $R^2 > 0.90$ – в лаборатории, хорошие данные

```
Call:
lm(formula = y ~ ., data = data)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max
-2.81177 -0.58567  0.05249  0.69674  2.40316

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  0.04580    0.05694   0.804  0.42188
x1           0.42949    0.05874   7.311 2.52e-12 ***
x2           0.57386    0.06638   8.646 3.52e-16 ***
x3           0.26152    0.05773   4.530 8.58e-06 ***
x4          -0.29599    0.05444  -5.438 1.14e-07 ***
x5          -0.17564    0.05428  -3.236  0.00135 **
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 0.9733 on 294 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.4131,    Adjusted R-squared:  0.4032
F-statistic: 41.39 on 5 and 294 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Априорный R^2

- Какого качество ваших данных?
- Вы учли все факторы для построения модели?
- Правильно ли вы собрали данные?

$$R^2 \sim \text{Beta}(\mu = \tilde{\mu}_r, \sigma = \tilde{\sigma}_r)$$



Заметка

Это не байесовский R^2. **Априорный R^2 – ожидаемый уровень качества модели.**

Почувствуем разницу

Было

- Как задать априорное для β?
- Какой у него смысл?
- Хм, нужно поменять априорное, если я добавлю параметры
- Как задать априорное для σ?
- Слишком сложное, есть базовые значения?
- Эх, базовые значения бессмыслены

Стало

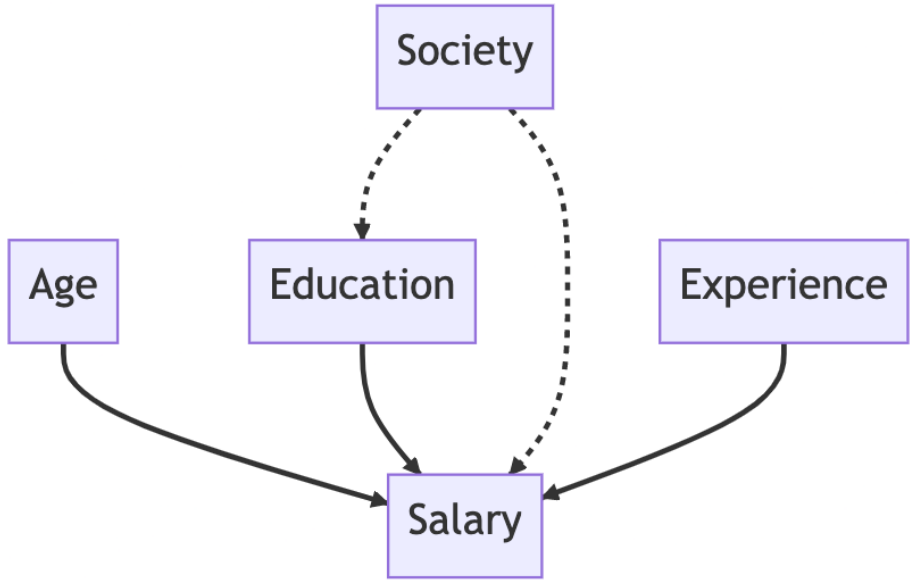
- Как хороша модель? Смотрим на R^2
- Какая переменная более или менее важная?
- Какое направление влияние будет у переменных?

Важность переменных

Мы предсказываем зарплату,

- что важнее – возраст или опыт?
- что важнее – опыт или образование?

В традиционных моделях – ответить можно только после оценки

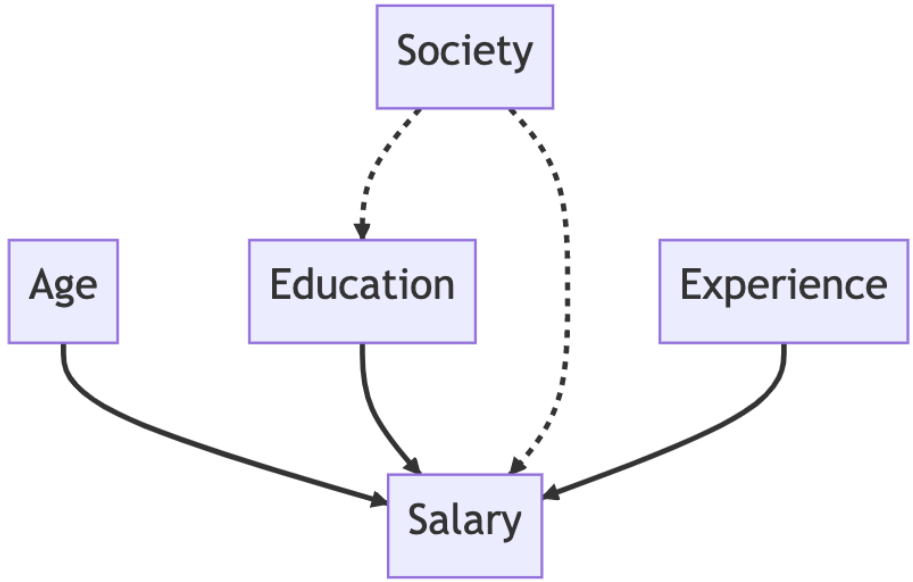


Важность переменных

Мы предсказываем зарплату,

- что важнее – возраст или опыт?
- что важнее – опыт или образование?

В традиционных моделях – ответить можно только после оценки



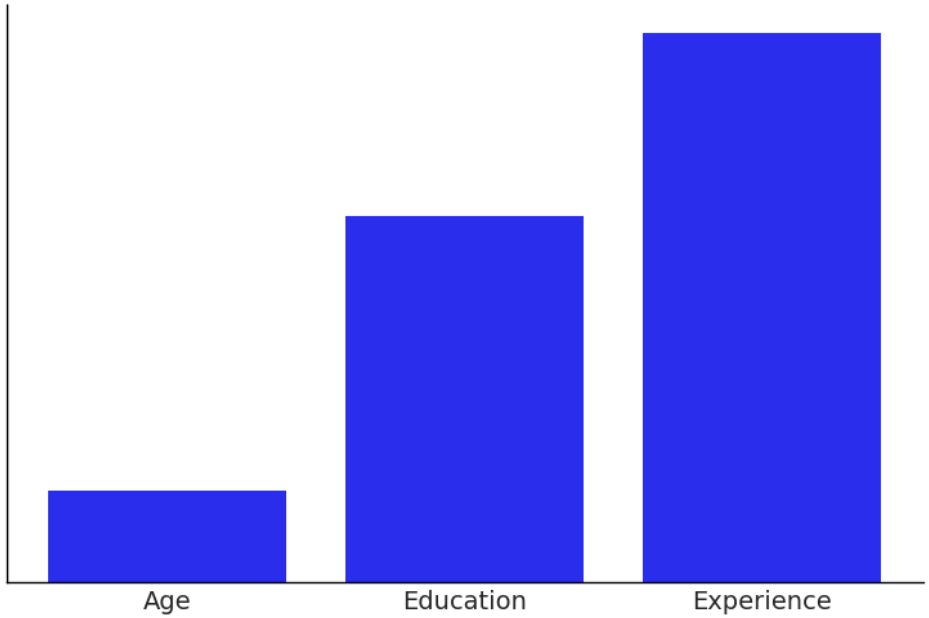
Байесовский подход

- Делаем предположения, какие фичи важнее для модели
- Используем байесовские инструментальные переменные

Что такое важность переменных?

Некоторые определения

- Объемы информации, которые получаем
- **F**raction of **V**ariance **E**xplained



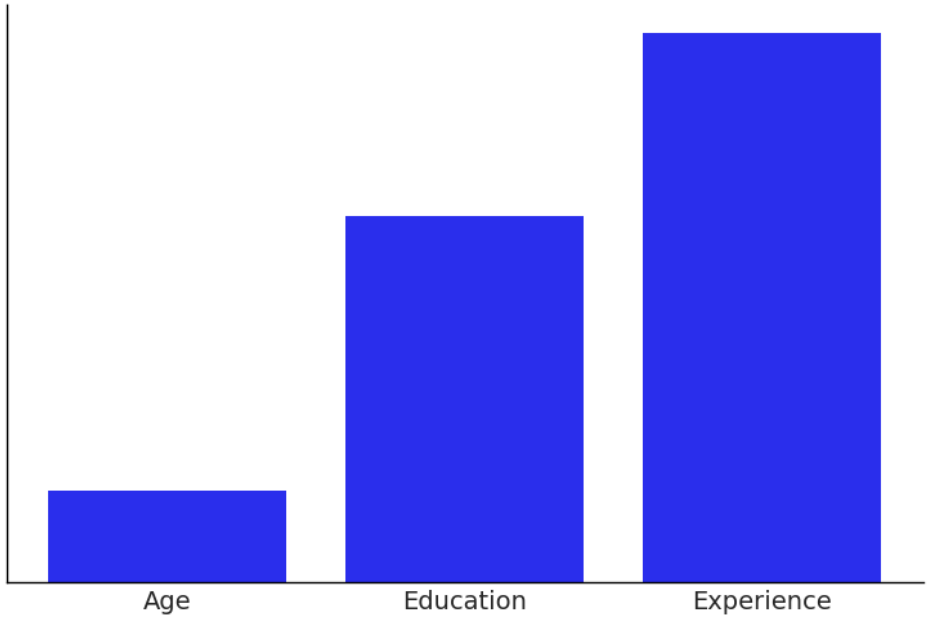
Что такое важность переменных?

Некоторые определения

- Объемы информации, которые получаем
- **F**raction of **V**ariance **E**xplained

Аналогичный подход!

Как и в случае R^2, можно считать **FVE** для фичи



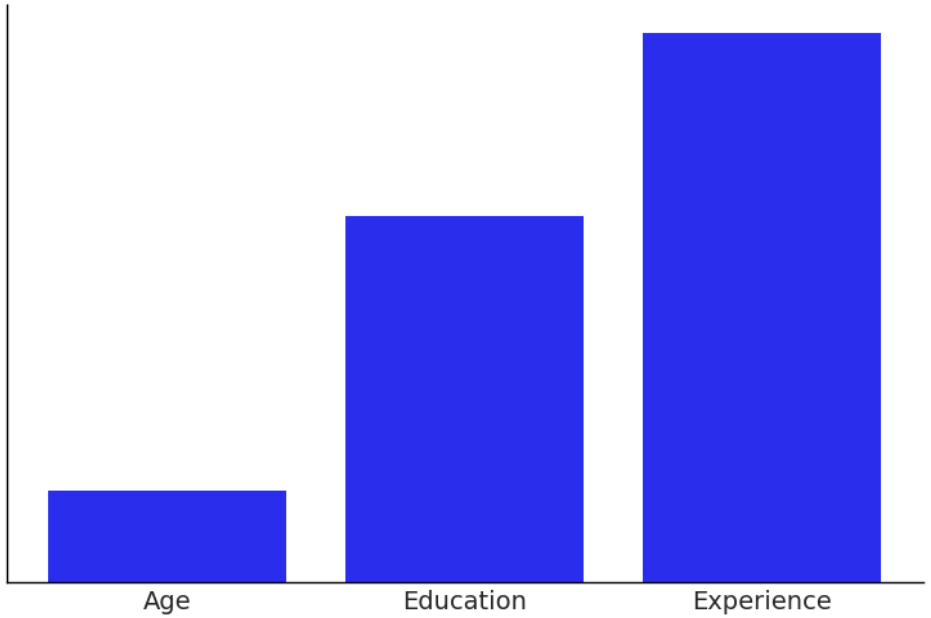
Что такое важность переменных?

Некоторые определения

- Объемы информации, которые получаем
- **F**raction of **V**ariance **E**xplained

Аналогичный подход!

Как и в случае R^2, можно считать **FVE** для фичи



Идея проста

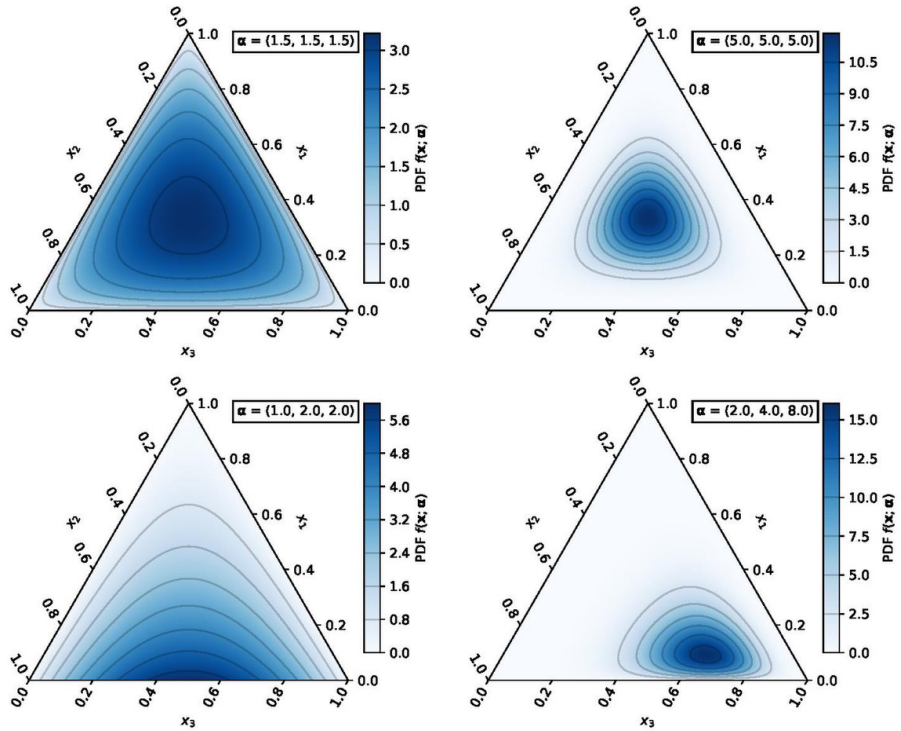
$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\alpha_{\text{FVE}})$$

Разбираем с априорным распределением для FVE

Надо разобраться с распределением Дирихле

$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\alpha_{\text{FVE}})$$

- Чем больше α_i, тем более i-ая переменная важна
- Чем больше α_i тем больше уверенности в важности переменной



Примеры α_{FVE}

$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\alpha_{\text{FVE}})$$

- $\alpha_{\text{FVE}} = (1, 1, 1)$ - Ничего не знаем про важность, возможно какие-то пемененные не нужны
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 1$ - переменную можно не использовать или она очень важна, не ясно
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 10$ - скорее всего, переменная важна
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 20$ - переменную точно надо использовать
- $\alpha_{\text{FVE}} = (10, 20, 30)$ - Используем все переменные, но 2-ая и 3-ая переменные важнее для модели

Примеры α_{FVE}

$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\alpha_{\text{FVE}})$$

- $\alpha_{\text{FVE}} = (1, 1, 1)$ - Ничего не знаем про важность, возможно какие-то пемененные не нужны
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 1$ - переменную можно не использовать или она очень важна, не ясно
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 10$ - скорее всего, переменная важна
- $(\alpha_{\text{FVE}})_i = 20$ - переменную точно надо использовать
- $\alpha_{\text{FVE}} = (10, 20, 30)$ - Используем все переменные, но 2-ая и 3-ая переменные важнее для модели

Дисклеймер

Да, это самая вольная интерпретация того, как это работает

α_{FVE} и R^2

$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\tilde{\alpha}_{\text{FVE}})$$
$$R^2 \sim \text{Beta}(\mu = \tilde{\mu}_r, \sigma = \tilde{\sigma}_r)$$

Что решаем

1. Насколько хороша модель в принципе (R^2)
2. Насколько важна отдельная фича ($\tilde{\alpha}_{\text{FVE}}$)

Подводим итоги

1. Стандартизируем данные: $a \mapsto \frac{a - \text{mean}(a)}{\text{std}(a)}$
2. Предположения о R^2
3. Предполажения о важности переменных
4. Готово

$$\bar{y}_i \sim \mathcal{N}(\bar{\beta}^\top \bar{x}_i, \sigma)$$
$$\phi_{\text{FVE}} \sim \text{Dirichlet}(\tilde{\alpha}_{\text{FVE}})$$
$$R^2 \sim \text{Beta}(\mu = \tilde{\mu}_r, \sigma = \tilde{\sigma}_r)$$
$$\sigma^2 = 1 - R^2$$
$$\bar{\beta} \sim \mathcal{N}(0, \sqrt{\phi_{\text{FVE}} \cdot R^2})$$

Больше формул

Вот недавно разработанный R2D2M2 [1], можно почитать математические выкладки.

Что-то еще можно учесть? R2D2M2CP

Да, конечно

- "Какой знак у корреляции?"
- "Насколько я уверен, что корреляция – позитивная?"

Что-то еще можно учесть? R2D2M2CP

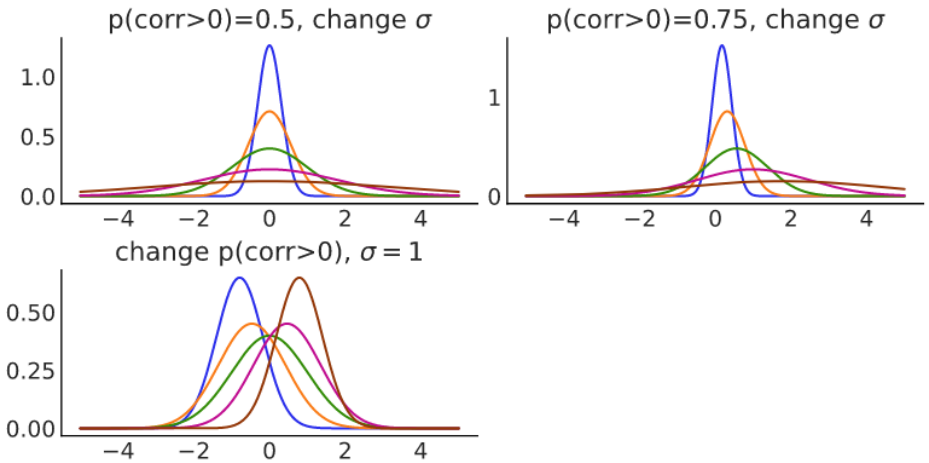
Да, конечно

- "Какой знак у корреляции?"
- "Насколько я уверен, что корреляция – позитивная?"

Какое предлагаю решение:

$$P(\bar{\beta}_j > 0) = (\psi_{CP})_j$$

$$\psi_{CP} \sim \text{Beta}(\mu = \mu_{CP}, \sigma = \sigma_{CP})$$



Технические детали

$$
\begin{aligned}
P(\bar{\beta}_j > 0) &= (\psi_{CP})_j \\
\bar{\beta} &\sim \mathcal{N}(\mu_{CP}(\psi_{CP}, R^2 \cdot \phi_{\text{FVE}}), \sigma_{CP}(\psi_{CP}, R^2 \cdot \phi_{\text{FVE}})) \\
\psi_{CP} &\sim \text{Beta}(\mu = \mu_{CP}, \sigma = \sigma_{CP}) \\
\phi_{\text{FVE}} &\sim \text{Dirichlet}(\tilde{\alpha}_{\text{FVE}}) \\
R^2 &\sim \text{Beta}(\mu = \tilde{\mu}_r, \sigma = \tilde{\sigma}_r)
\end{aligned}
$$

Значения μ_{CP}, σ_{CP} – единственные

$$
\begin{cases}
\mu_{CP}(p, v) = \dfrac{\sqrt{2v}\,\text{erf}^{-1}(2p-1)}{\sqrt{2\,\text{erf}^{-1}(2p-1)^2+1}} \\
\sigma_{CP}(p, v) = \dfrac{\sqrt{v}}{\sqrt{2\,\text{erf}^{-1}(2p-1)^2+1}}
\end{cases}
$$

Подводим итоги

Чтобы R2D2M2CP работал

1. Стандартизируем данные: $a \mapsto \frac{a - \text{mean}(a)}{\text{std}(a)}$
2. Предположение о R^2
3. Предположение о важности переменных
4. Предположение о знаке корреляций между переменным
5. Точно готово!

Пример практического применения [2]

https://github.com/pymc-devs/pymc-experimental/pull/137

Вернем к обобщенным линейным моделям

Рассмотрим следующие предпосылки:

$$y_i \sim \mathcal{T}(\nu_i, m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \ldots$$
$$\log s_i \sim z_i + \ldots$$

Вернем к обобщенным линейным моделям

Рассмотрим следующие предпосылки:

$$y_i \sim \mathcal{T}(\nu_i, m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \dots$$
$$\log s_i \sim z_i + \dots$$

- Какие переменные важны s?
  (предположение о важности переменных)

Априорное для Nu

Число степеней свободы можно рассчитать при следующем предположении:
https://github.com/pymc-devs/pymc-experimental/pull/252

Вернем к обобщенным линейным моделям

Рассмотрим следующие предпосылки:

$$y_i \sim \mathcal{T}(\nu_i, m_i, s_i)$$
$$m_i \sim x_i + \ldots$$
$$\log s_i \sim z_i + \ldots$$

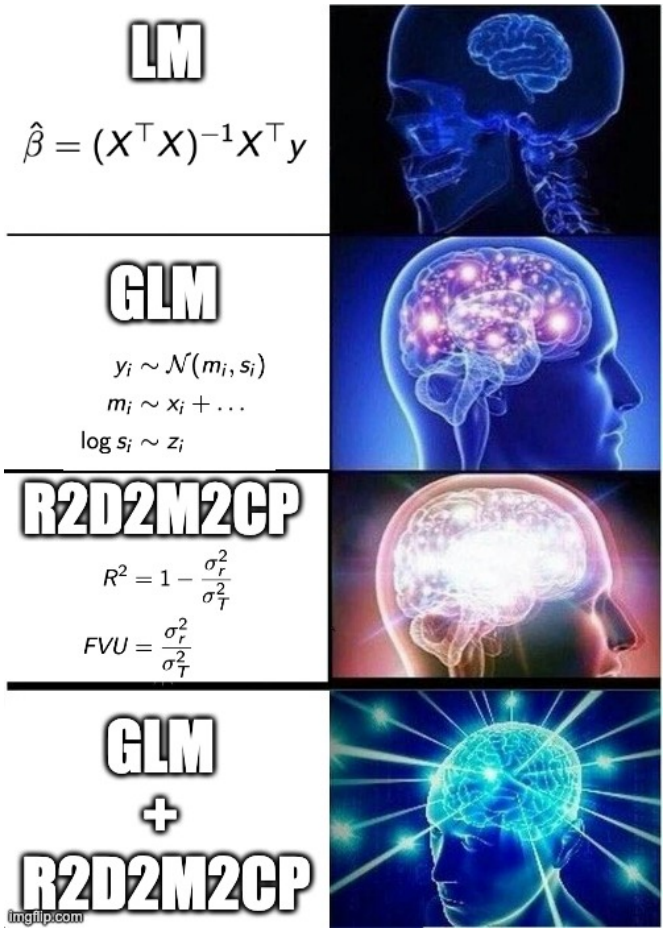
- Какие переменные важны s?
  (предположение о важности переменных)
- Они вообще как-то влияют? (предположение о R^2)

Априорное для Nu

Число степеней свободы можно рассчитать при следующем предположении:
https://github.com/pymc-devs/pymc-experimental/pull/252

Финальные заметки

- R2D2M2CP – труднопроизносимый термин
- Дает о чем подумать при использовании традиционных моделей
- Расширяет применение обобщенных линейных моделей, позволяя контролировать вспомогательные модели
- Дополнительные инструмент для работы с обобщенными аддитивными моделями с применением гауссовских процессов



Ссылки I

J. E. Aguilar and P.-C. Bürkner.
Intuitive joint priors for bayesian linear multilevel models: The r2d2m2 prior, 2023.

M. Kochurov.
pymc-devs/pymc-experimental: Pull Request 137 R2D2M2CP.
GitHub, 2023.