Introduction à la modélisation statistique bayésienne

Un cours en R, Stan, et brms

Ladislas Nalborczyk (LPC, LNC, CNRS, Aix-Marseille Univ)

Planning

Cours n°01: Introduction à l'inférence bayésienne

Cours n°02: Modèle Beta-Binomial

Cours n°03 : Introduction à brms, modèle de régression linéaire

Cours n°04 : Modèle de régression linéaire (suite)

Cours n°05: Markov Chain Monte Carlo

Cours n°06 : Modèle linéaire généralisé

Cours n°07 : Comparaison de modèles

Cours n°08: Modèles multi-niveaux

Cours n°09 : Modèles multi-niveaux généralisés

Cours n°10: Data Hackathon



Langage de la modélisation

```
y_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)

\mu_i = \alpha + \beta x_i

\alpha \sim \text{Normal}(60, 10)

\beta \sim \text{Normal}(0, 10)

\sigma \sim \text{HalfCauchy}(0, 1)
```

Objectif de la séance : comprendre ce type de modèle.

Les constituants de nos modèles seront toujours les mêmes et nous suivrons les trois mêmes étapes :

- Construire le modèle (likelihood + priors).
- Mettre à jour grâce aux données, afin de calculer la distribution postérieure.
- Interpréter les estimations du modèle, évaluer ses prédictions, éventuellement modifier le modèle.



Un premier modèle

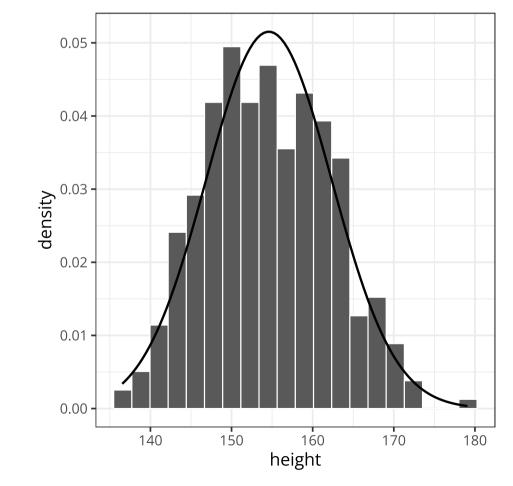
```
1 library(tidyverse)
  2 library(imsb)
  4 d <- open data(howell)
  5 str(d)
 data.frame': 544 obs. of 4 variables:
 $ height: num 152 140 137 157 145 ...
 $ weight: num 47.8 36.5 31.9 53 41.3 ...
 $ age : num 63 63 65 41 51 35 32 27 19 54 ...
 $ male : int 1 0 0 1 0 1 0 1 0 1 ...
  1 d2 <- d %>% filter(age >= 18)
  2 head(d2)
   height weight age male
1 151.765 47.82561 63
2 139.700 36.48581 63
3 136.525 31.86484 65
4 156.845 53.04191 41
5 145.415 41.27687 51
                        0
6 163.830 62.99259 35
```



Un premier modèle

```
h_i \sim \text{Normal}(\mu, \sigma)
```

```
1 d2 %>%
2    ggplot(aes(x = height) ) +
3    geom_histogram(aes(y = ..density..), bins = 20, col = "white") +
4    stat_function(fun = dnorm, args = list(mean(d2$height), sd(d2$height) ), size = 1)
```

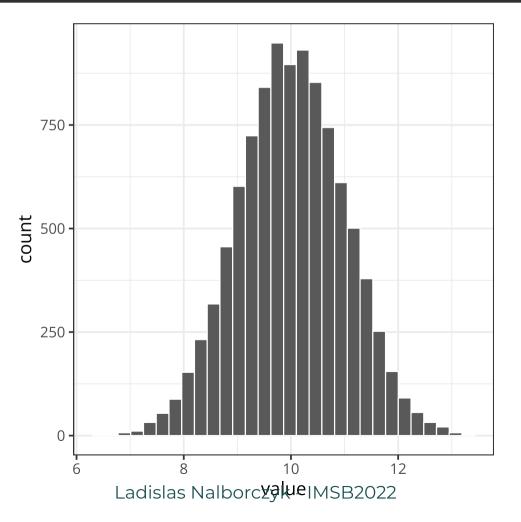






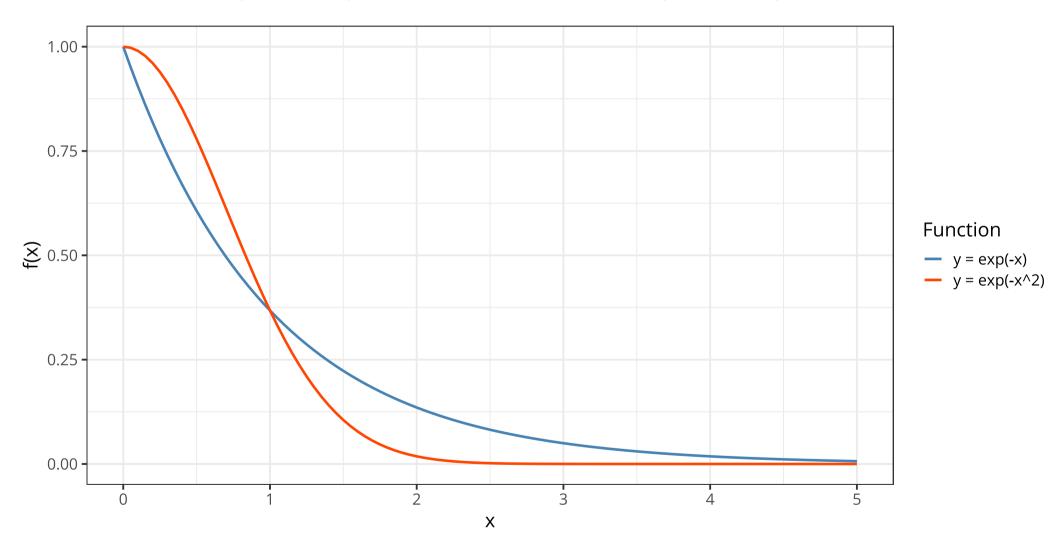
Loi normale

$$p(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mu - x)^2\right]$$





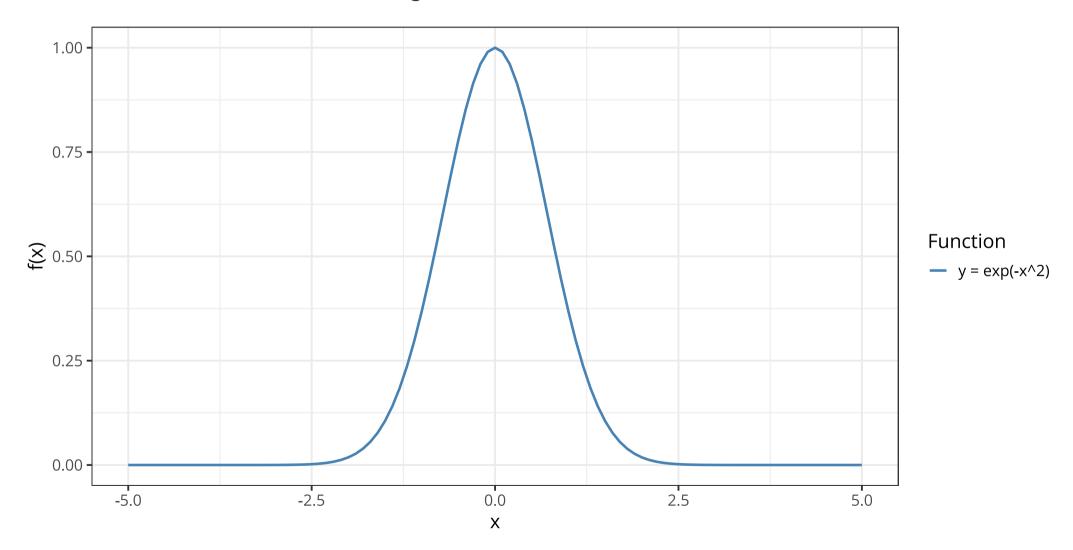
Contraintes : Certaines valeurs soient fortement probables (autour de la moyenne μ). Plus on s'éloigne, moins les valeurs sont probables (en suivant une décroissance exponentielle).





$$y = \exp\left[-x^2\right]$$

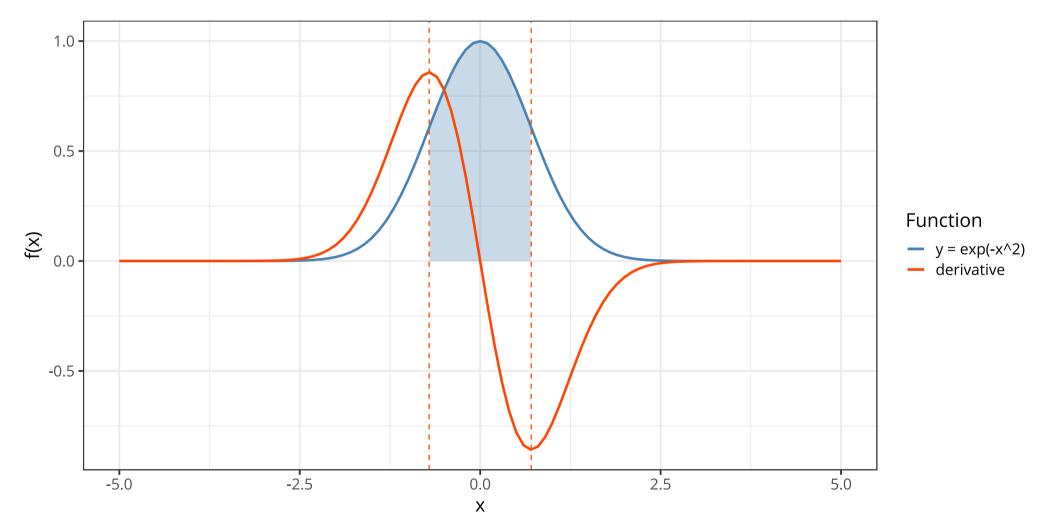
On étend notre fonction aux valeurs négatives.





$$y = \exp\left[-x^2\right]$$

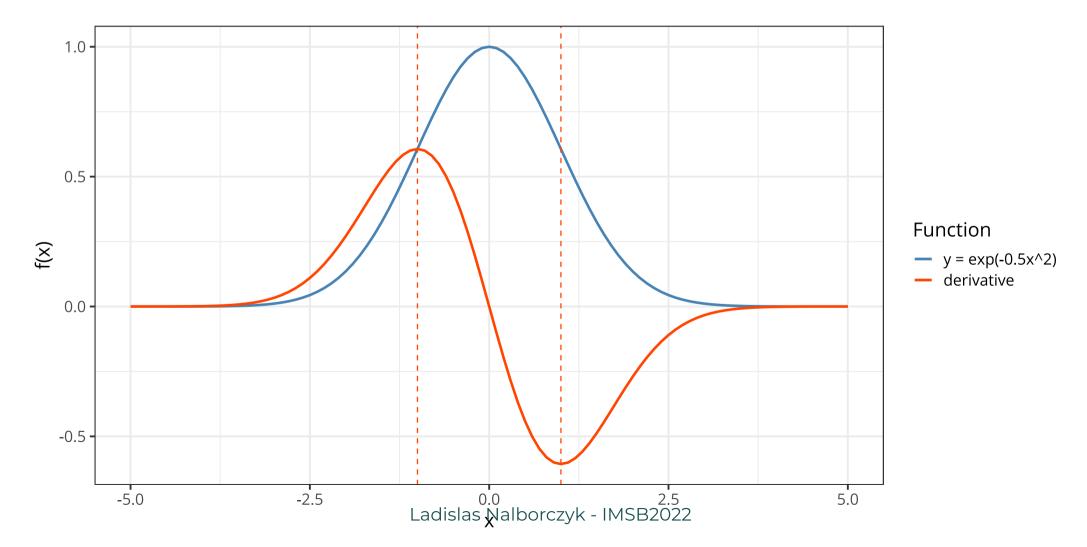
Les points d'inflection nous donnent une bonne indication de là où la plupart des valeurs se trouvent (i.e., entre les points d'inflection). Les pics de la dérivée nous montrent les points d'inflection.





$$y = \exp\left[-\frac{1}{2}x^2\right]$$

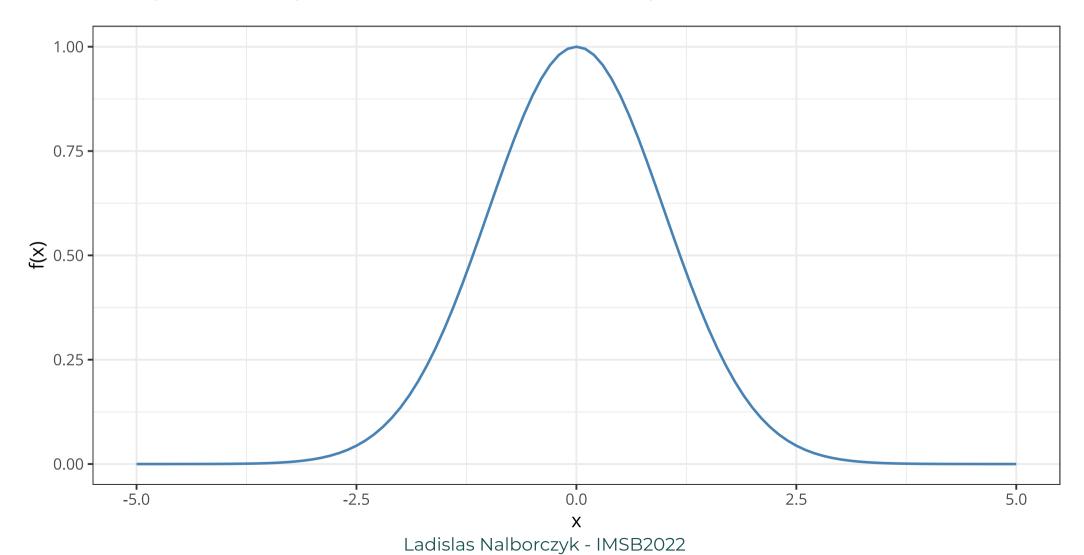
Ensuite on standardise la distribution de manière à ce que les deux points d'inflection se trouvent à x = -1 et x = 1.





$$y = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right]$$

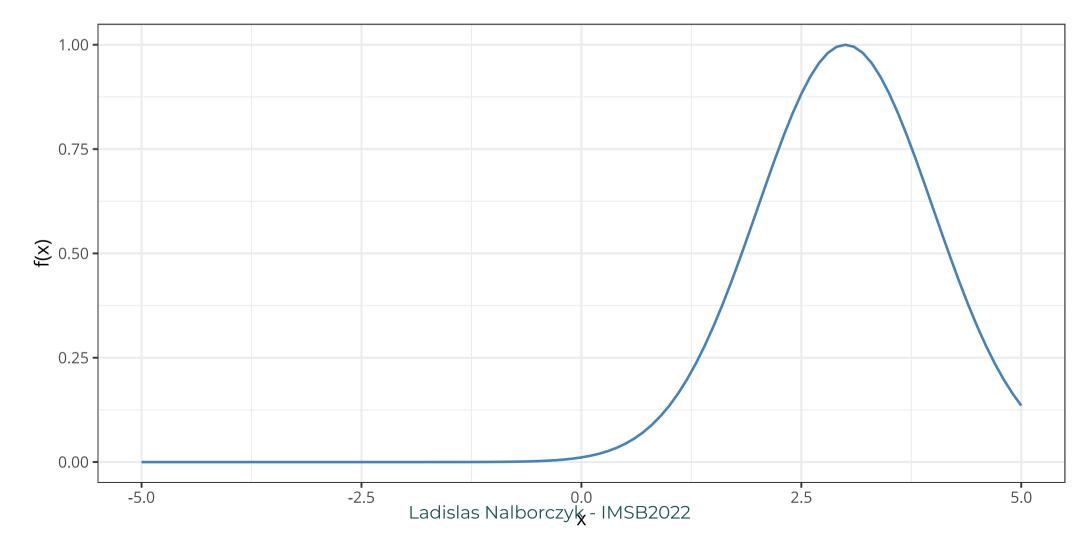
On insère un paramètre σ^2 pour contrôler la distance entre les points d'inflection.





$$y = \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mu - x)^2\right]$$

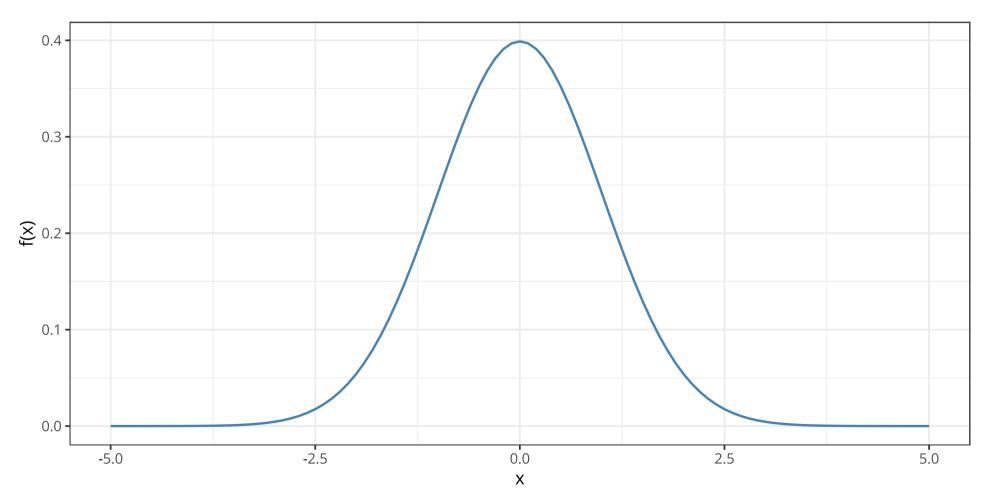
On insère ensuite un paramètre μ afin de pouvoir contrôler la position (la tendance centrale) de la distribution.





$$y = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mu - x)^2\right]$$

Mais... cette distribution n'intègre pas à 1. On divise donc par une constante de normalisation (la partie gauche), afin d'obtenir une distribution de probabilité.





Modèle gaussien

Nous allons construire un modèle de régression, mais avant d'ajouter un prédicteur, essayons de modéliser la distribution des tailles.

On cherche à savoir quel est le modèle (la distribution) qui décrit le mieux la répartition des tailles. On va donc explorer toutes les combinaisons possibles de μ et σ et les classer par leurs probabilités respectives.

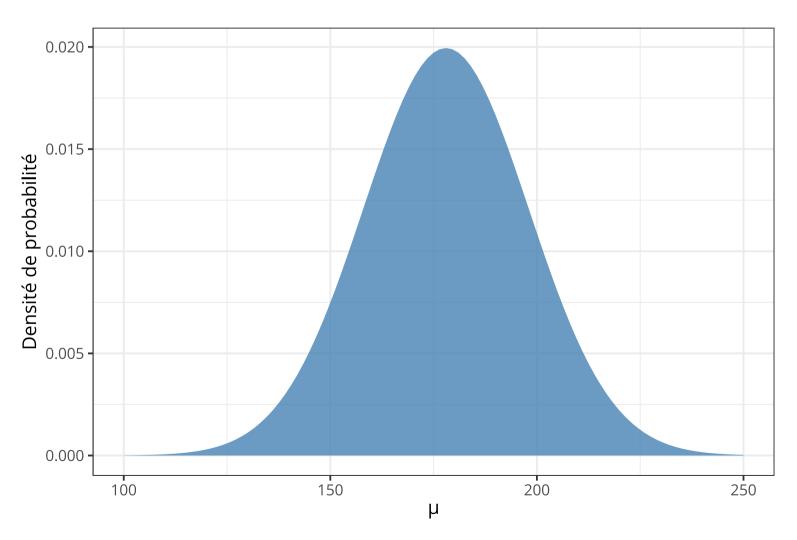
Notre but, une fois encore, est de décrire **la distribution postérieure**, qui sera donc d'une certaine manière **une distribution de distributions**.



Modèle gaussien

On définit $p(\mu, \sigma)$, la distribution a priori conjointe de tous les paramètres du modèle. On peut spécifier ces priors indépendamment pour chaque paramètre, sachant que $p(\mu, \sigma) = p(\mu)p(\sigma)$.

 $\mu \sim \text{Normal}(178, 20)$

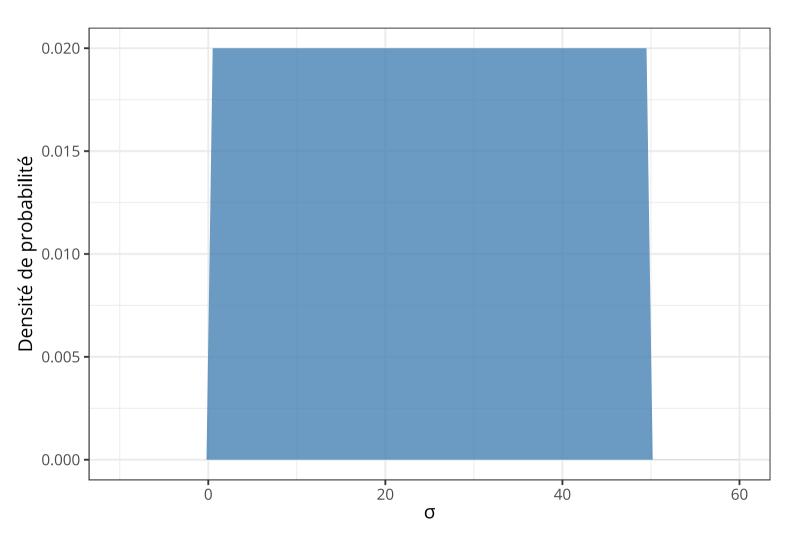




Modèle gaussien

On définit $p(\mu, \sigma)$, la distribution a priori conjointe de tous les paramètres du modèle. On peut spécifier ces priors indépendamment pour chaque paramètre, sachant que $p(\mu, \sigma) = p(\mu)p(\sigma)$.

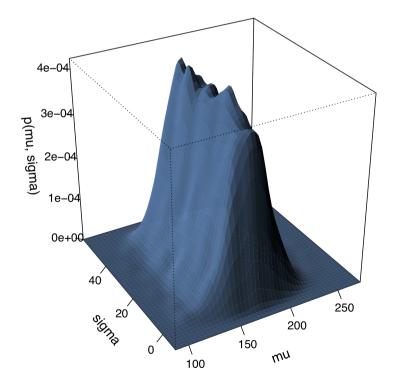
 $\sigma \sim \text{Uniform}(0, 50)$





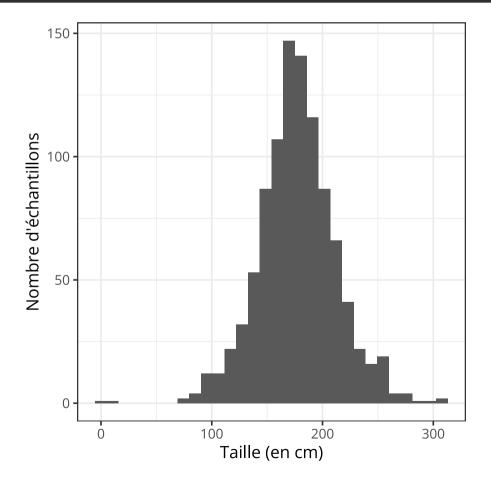
Visualiser le prior

```
1 library(ks)
2 sample_mu <- rnorm(le4, 178, 20) # prior on mu
3 sample_sigma <- runif(le4, 0, 50) # prior on sigma
4 prior <- data.frame(cbind(sample_mu, sample_sigma)) # multivariate prior
5 H.scv <- Hscv(x = prior, verbose = TRUE)
6 fhat_prior <- kde(x = prior, H = H.scv, compute.cont = TRUE)
7 plot(
8     fhat_prior, display = "persp", col = "steelblue", border = NA,
9     xlab = "\nmu", ylab = "\nsigma", zlab = "\n\np(mu, sigma)",
10     shade = 0.8, phi = 30, ticktype = "detailed",
11     cex.lab = 1.2, family = "Helvetica")</pre>
```





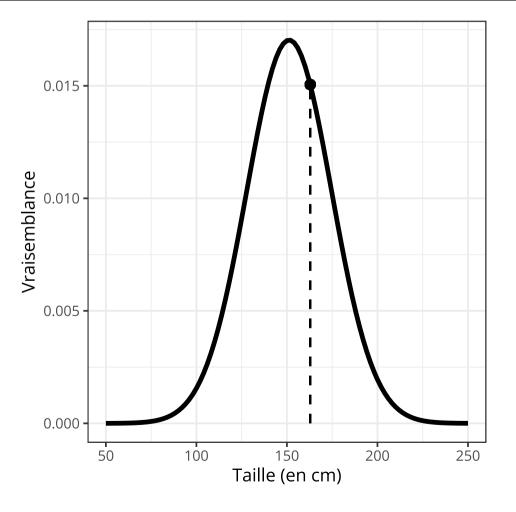
Prior predictive checking





Fonction de vraisemblance

```
1 mu_exemple <- 151.23
2 sigma_exemple <- 23.42
3
4 d2$height[34] # une observation de taille (pour exemple)</pre>
[1] 162.8648
```





Fonction de vraisemblance

On veut calculer la probabilité d'observer une certaine valeur de taille, sachant certaines valeurs de μ et σ , c'est à dire :

$$p(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mu - x)^2\right]$$

On peut calculer cette densité de probabilité à l'aide des fonctions dnorm, dbeta, dt, dexp, dgamma, etc.

1 dnorm(d2\$height[34], mu_exemple, sigma_exemple)

[1] 0.01505675



Fonction de vraisemblance

$$p(x \mid \mu, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(\mu - x)^2\right]$$

Ou avec une fonction maison...

```
1 normal_likelihood <- function (x, mu, sigma) {
2
3   bell <- exp( (- 1 / (2 * sigma^2) ) * (mu - x)^2 )
4   norm <- sqrt(2 * pi * sigma^2)
5   return(bell / norm)
7   8 }
1 normal_likelihood(d2$height[34], mu_exemple, sigma_exemple)</pre>
```



Distribution postérieure

$$p(\mu, \sigma \mid h) = \frac{\prod_{i} \text{Normal}(h_{i} \mid \mu, \sigma) \text{Normal}(\mu \mid 178, 20) \text{Uniform}(\sigma \mid 0, 50)}{\int \int \prod_{i} \text{Normal}(h_{i} \mid \mu, \sigma) \text{Normal}(\mu \mid 178, 20) \text{Uniform}(\sigma \mid 0, 50) d\mu d\sigma}$$
$$p(\mu, \sigma \mid h) \propto \prod_{i} \text{Normal}(h_{i} \mid \mu, \sigma) \text{Normal}(\mu \mid 178, 20) \text{Uniform}(\sigma \mid 0, 50)$$

Il s'agit de la même formule vue lors des cours 1 et 2, mais cette fois en considérant qu'il existe plusieurs observations de taille (h_i) , et deux paramètres à estimer : μ et σ .

Pour calculer la **vraisemblance marginale** (en vert), il faut donc intégrer sur deux paramètres : μ et σ . On réalise ici encore que la probabilité a posteriori est proportionnelle au produit de la vraisemblance et du prior.



Distribution postérieure - Grid approximation

```
1 # on définit une grille de valeurs possibles pour mu et sigma
2 mu.list <- seg(from = 140, to = 160, length.out = 200)
3 sigma.list \leftarrow seq(from = 4, to = 9, length.out = 200)
5 # on étend la grille en deux dimensions (chaque combinaison de mu et sigma)
6 post <- expand.grid(mu = mu.list, sigma = sigma.list)</pre>
   # calcul de la log-vraisemblance (pour chaque couple de mu et sigma)
   post$LL <-
     sapply(
10
       1:nrow(post),
11
12
       function(i) sum(dnorm(
13
         d2$height,
14
        mean = post$mu[i],
         sd = post$sigma[i],
15
16
        log = TRUE)
17
18
19
   # calcul de la probabilité a posteriori (non normalisée)
21 post$prod <-
22
     post$LL +
23
     dnorm(post$mu, 178, 20, log = TRUE) +
24
     dunif(post$sigma, 0, 50, log = TRUE)
25
```



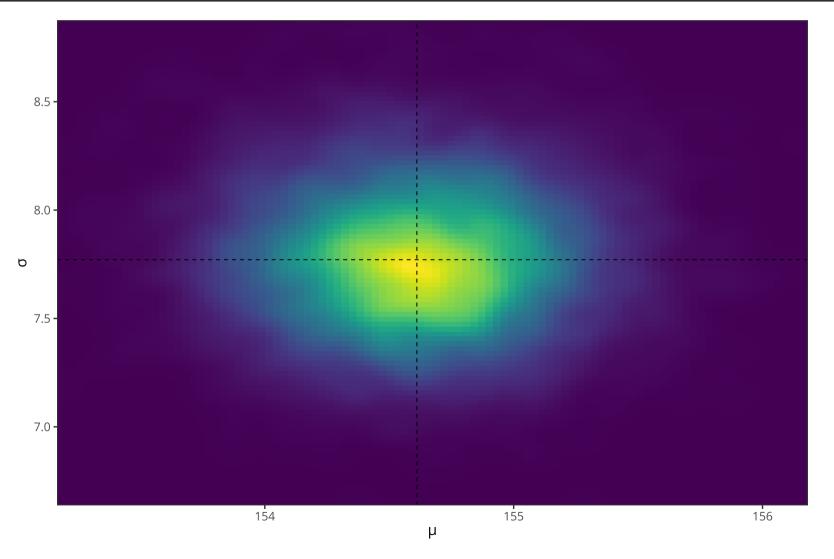
Distribution postérieure - Grid approximation

```
1 # select random 20 rows of the dataframe
  2 post %>% slice sample(n = 20, replace = FALSE)
               sigma
                            LL
                                    prod
                                                  prob
  140.4020 8.949749 -1669.018 -1678.611 1.851262e-196
  152.3618 8.824121 -1236.343 -1244.991
                                        3.856066e-08
  155.2764 7.065327 -1224.068 -1232.540
                                         9.856972e-03
  157.4874 6.939698 -1254.355 -1262.708
                                        7.798220e-16
  157.7889 6.386935 -1278.010 -1286.347 4.221437e-26
  155.4774 5.055276 -1310.848 -1319.309 2.044278e-40
  149.4472 4.025126 -1751.071 -1759.917 9.054090e-232
  155.3769 6.185930 -1242.628 -1251.094 8.626726e-11
  148.0402 4.075377 -1907.013 -1915.961 1.540404e-299
10 151.0553 8.698492 -1253.112 -1261.846
                                         1.845524e-15
11 147.8392 5.909548 -1480.217 -1489.181 3.435830e-114
12 152.4623 8.095477 -1232.367 -1241.009
                                        2.068862e-06
13 142.7136 4.075377 -2947.893 -2957.276
                                        0.000000e+00
14 156.7839 8.221106 -1233.134 -1241.523
                                         1.237383e-06
15 152.5628 8.045226 -1231.201 -1239.836
                                        6.683351e-06
16 149.1457 4.075377 -1766.335 -1775.202 2.082933e-238
17 141.8090 6.236181 -1978.355 -1987.818 0.000000e+00
18 159.5980 4.603015 -1565.130 -1573.380 9.310976e-151
19 148.6432 6.939698 -1353.373 -1362.277 4.463307e-59
20 156.4824 5.005025 -1335.275 -1343.681 5.320236e-51
```



Distribution postérieure - Grid approximation

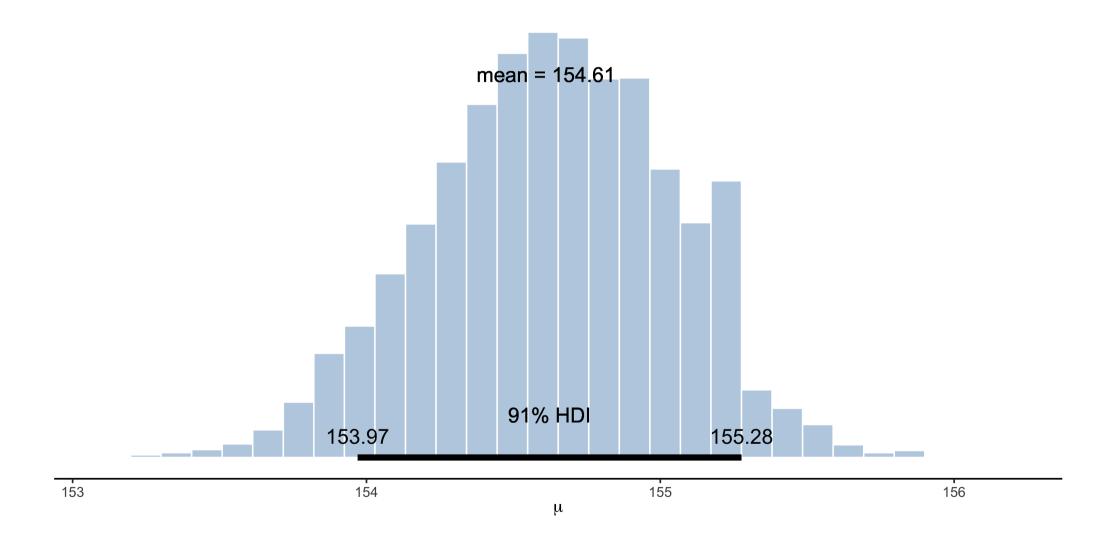
```
1 sample.rows <- sample(x = 1:nrow(post), size = 1e4, replace = TRUE, prob = post$prob)
2 sample.mu <- post$mu[sample.rows]
3 sample.sigma <- post$sigma[sample.rows]</pre>
```





Distribution postérieure - Distributions marginales

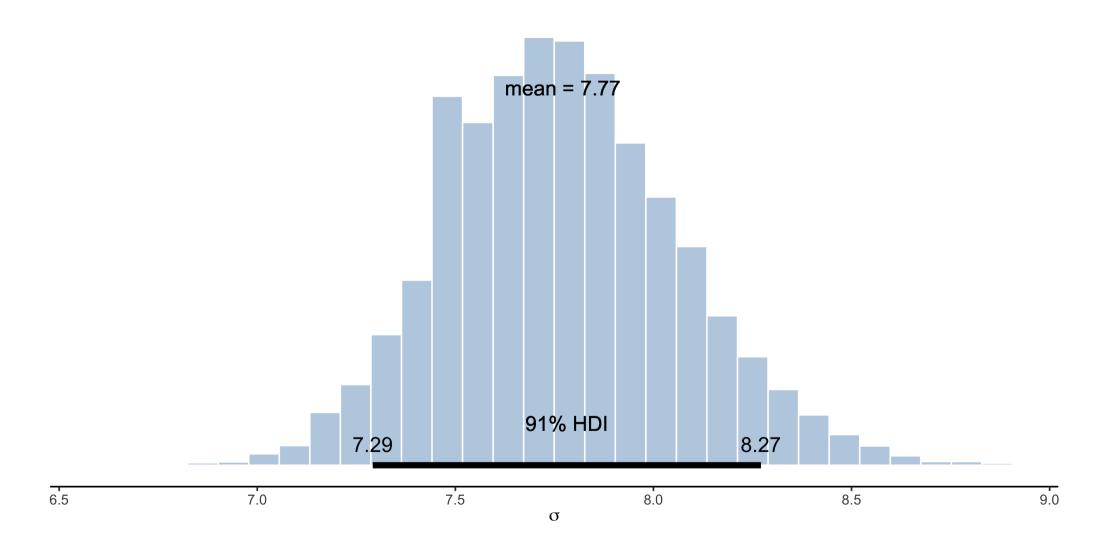
1 posterior_plot(samples = sample.mu, nbins = 30) + labs(x = expression(mu))





Distribution postérieure - Distributions marginales

1 posterior_plot(samples = sample.sigma, nbins = 30) + labs(x = expression(sigma))





Introduction à brms

Under the hood : **Stan** est un langage de programmation probabiliste écrit en **C++**, et qui implémente plusieurs algorithmes de MCMC : HMC, NUTS, L-BFGS...

```
1 data {
     int<lower=0> J; // number of schools
     real y[J]; // estimated treatment effects
 3
     real<lower=0> sigma[J]; // s.e. of effect estimates
 4
 5
 6
   parameters {
 8
     real mu;
     real<lower=0> tau;
9
10
     real eta[J];
11
12
   transformed parameters {
14
     real theta[J];
     for (j in 1:J)
15
16
       theta[j] = mu + tau * eta[j];
17
18
19 model {
     target += normal lpdf(eta | 0, 1);
20
     target += normal lpdf(y | theta, sigma);
21
22
```



Bayesian regression models using Stan

Le package **brms** (<u>Bürkner, 2017</u>) permet de fitter des modèles multi-niveaux (ou pas) linéaires (ou pas) bayésiens en **Stan** mais en utilisant la syntaxe de **lme4**.

Par exemple, le modèle suivant :

$$y_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)$$

 $\mu_i = \alpha + \alpha_{\text{subject}[i]} + \alpha_{\text{item}[i]} + \beta x_i$

se spécifie avec **brms** (comme avec **lme4**) de la manière suivante :

```
1 model <- brm(y ~ x + (1 | subject) + (1 | item), data = d, family = gaussian() )
```



Rappels de syntaxe

Le package **brms** utilise la même syntaxe que les fonctions de base R (comme **lm**) ou que le package **lme4**.

```
1 Reaction ~ Days + (1 + Days | Subject)
```

La partie gauche représente notre variable dépendante (ou outcome, i.e., ce qu'on essaye de prédire). Le package **brms** permet également de fitter des modèles multivariés (plusieurs outcomes) en les combinant avec **mvbind()**.

```
1 mvbind(Reaction, Memory) ~ Days + (1 + Days | Subject)
```

La partie droite permet de définir les prédicteurs. L'intercept est généralement implicite, de sorte que les deux écritures ci-dessous sont équivalentes.

```
1 mvbind(Reaction, Memory) ~ Days + (1 + Days | Subject)
2 mvbind(Reaction, Memory) ~ 1 + Days + (1 + Days | Subject)
```



Rappels de syntaxe

Si l'on veut fitter un modèle sans intercept (why not), il faut le spécifier explicitement comme ci-dessous.

```
1 mvbind(Reaction, Memory) ~ 0 + Days + (1 + Days | Subject)
```

Par défaut **brms** postule une vraisemblance gaussienne. Ce postulat peut être changé facilement en spécifiant la vraisemblance souhaitée via l'argument **family**.

```
1 brm(Reaction ~ 1 + Days + (1 + Days | Subject), family = lognormal())
```

Lisez la documentation (c'est très enthousiasmant à lire) accessible via ?brm.



Quelques fonctions utiles

```
1 # générer le code du modèle en Stan
2 make stancode(formula, ...)
3 stancode(fit)
5 # définir les priors
6 get prior(formula, ...)
   set prior(prior, ...)
9 # récupérer les prédictions du modèle
10 fitted(fit, ...)
11 predict(fit, ...)
12 conditional effects(fit, ...)
13
14 # posterior predictive checking
15 pp check(fit, ...)
16
17 # comparaison de modèles
18 loo(fit1, fit2, ...)
19 bayes factor(fit1, fit2, ...)
20 model weights(fit1, fit2, ...)
21
22 # test d'hypothèse
23 hypothesis(fit, hypothesis, ...)
```



Un premier exemple

```
1 library(brms)
2 mod1 <- brm(height ~ 1, data = d2)

1 posterior_summary(mod1, pars = c("^b_", "sigma"), probs = c(0.025, 0.975))

Estimate Est.Error Q2.5 Q97.5
b_Intercept 154.591780 0.4212333 153.753327 155.420404
sigma 7.762537 0.2969947 7.205733 8.353429</pre>
```

Ces données représentent les distributions marginales de chaque paramètre. En d'autres termes, la probabilité de chaque valeur de μ , moyennée sur toutes les valeurs possible de σ , est décrite par une distribution gaussienne avec une moyenne de 154.6 et un écart type de 0.42. L'intervalle de crédibilité (\neq intervalle de confiance) nous indique les 95% valeurs de μ ou σ les plus probables (sachant les données et les priors).



En utilisant notre prior

Par défaut **brms** utilise un prior très peu informatif centré sur la valeur moyenne de la variable mesurée. On peut donc affiner l'estimation réalisée par ce modèle en utilisant nos connaissances sur la distribution habituelle des tailles chez les humains.

La fonction **get_prior()** permet de visualiser une liste des priors par défaut ainsi que de tous les priors qu'on peut spécifier, sachant une certaine formule (i.e., une manière d'écrire notre modèle) et un jeu de données.



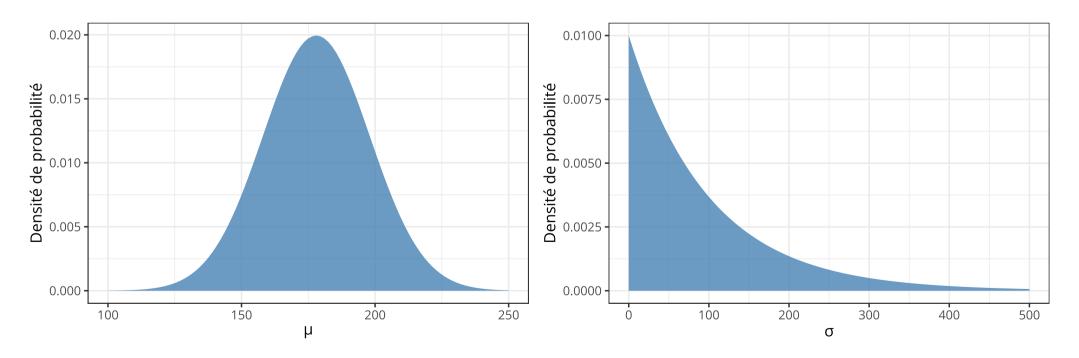
En utilisant notre prior

```
priors <- c(
prior(normal(178, 20), class = Intercept),
prior(exponential(0.01), class = sigma)

4  )

6  mod2 <- brm(
height ~ 1,
prior = priors,
family = gaussian(),
data = d2

11  )</pre>
```





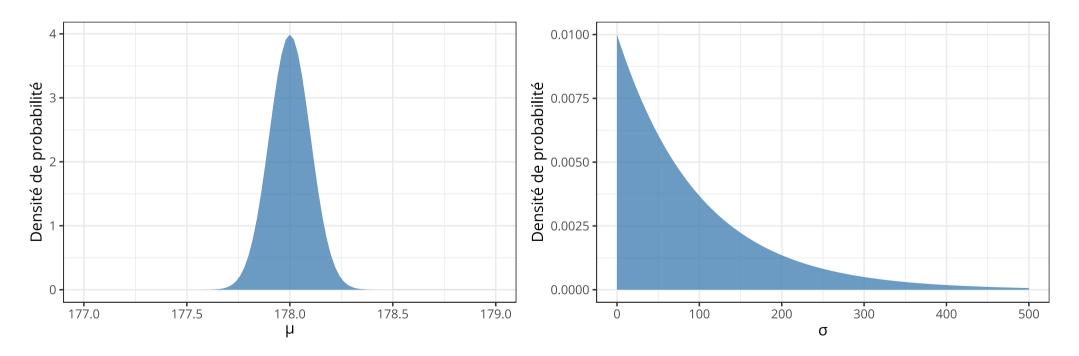
En utilisant notre prior

```
1 summary(mod2)
 Family: gaussian
 Links: mu = identity; sigma = identity
Formula: height ~ 1
   Data: d2 (Number of observations: 352)
  Draws: 4 chains, each with iter = 2000; warmup = 1000; thin = 1;
         total post-warmup draws = 4000
Population-Level Effects:
          Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                        0.42 153.79 155.43 1.00
Intercept 154.62
                                                       3339
                                                                 2429
Family Specific Parameters:
      Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                    0.30
                                     8.37 1.00
sigma
          7.77
                            7.19
                                                    3810
                                                            2544
Draws were sampled using sampling(NUTS). For each parameter, Bulk ESS
and Tail ESS are effective sample size measures, and Rhat is the potential
scale reduction factor on split chains (at convergence, Rhat = 1).
```



En utilisant un prior plus informatif

```
1 priors <- c(
2  prior(normal(178, 0.1), class = Intercept),
3  prior(exponential(0.01), class = sigma)
4  )
5
6  mod3 <- brm(
7  height ~ 1,
8  prior = priors,
9  family = gaussian(),
10  data = d2
11  )</pre>
```





En utilisant un prior plus informatif

```
1 summary(mod3)
 Family: gaussian
 Links: mu = identity; sigma = identity
Formula: height ~ 1
   Data: d2 (Number of observations: 352)
  Draws: 4 chains, each with iter = 2000; warmup = 1000; thin = 1;
         total post-warmup draws = 4000
Population-Level Effects:
          Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                        0.10 177.67 178.06 1.00
Intercept 177.87
                                                        4270
                                                                 2641
Family Specific Parameters:
      Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
sigma
         24.64
                    0.92
                            22.88
                                     26.51 1.00
                                                    3696
                                                             2687
Draws were sampled using sampling(NUTS). For each parameter, Bulk ESS
and Tail ESS are effective sample size measures, and Rhat is the potential
scale reduction factor on split chains (at convergence, Rhat = 1).
```

On remarque que la valeur estimée pour μ n'a presque pas "bougée" du prior...mais on remarque également que la valeur estimée pour σ a largement augmentée. Nous avons dit au modèle que nous étions assez certain de notre valeur de μ , le modèle s'est ensuite "adapté", ce qui explique la valeur de σ ...



Précision du prior (heuristique)

Le prior peut généralement être considéré comme un posterior obtenu sur des données antérieures.

On sait que le σ d'un posterior gaussien nous est donné par la formule :

$$\sigma_{\rm post} = 1 / \sqrt{n}$$

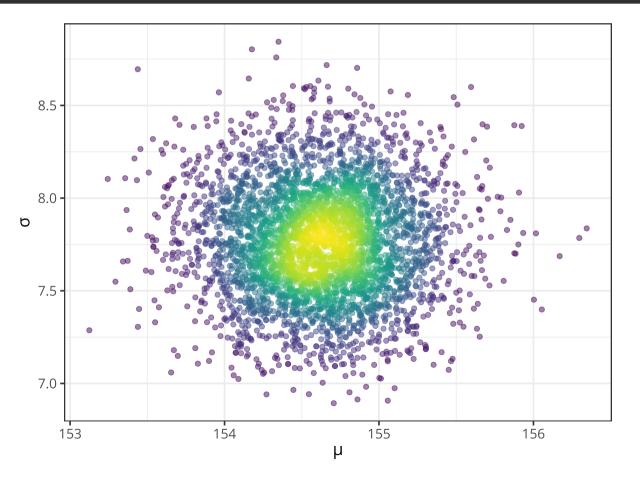
Qui implique une **quantité de données** n=1 / $\sigma_{\rm post}^2$. Notre prior avait un $\sigma=0.1$, ce qui donne n=1 / $0.1^2=100$.

On peut donc considérer que le prior $\mu \sim \text{Normal}(178, 0.1)$ est équivalent au cas dans lequel nous aurions observé 100 tailles de moyenne 178.

Visualiser les échantillons de la distribution postérieure

```
post <- as_draws_df(x = mod2) %>%
mutate(density = get_density(b_Intercept, sigma, n = 1e2))

ggplot(post, aes(x = b_Intercept, y = sigma, color = density)) +
geom_point(size = 2, alpha = 0.5, show.legend = FALSE) +
labs(x = expression(mu), y = expression(sigma)) +
viridis::scale_color_viridis()
```





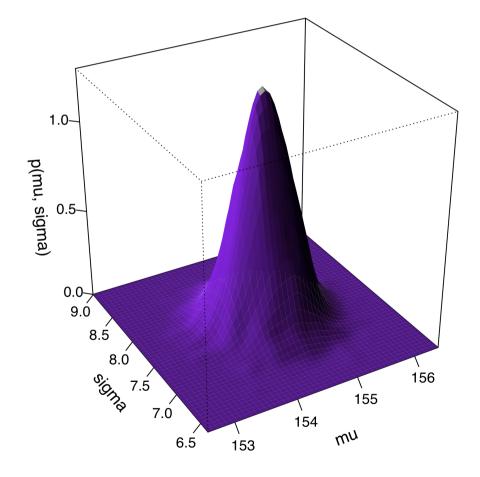
Récupérer les échantillons de la distribution postérieure

```
1 # gets the first 6 samples
  2 head(post)
# A draws df: 6 iterations, 1 chains, and 5 variables
  b Intercept sigma lprior lp density
          155
                7.8
                     -9.3 - 1227
                                   0.85
          154
                     -9.3 - 1227
                                   0.80
                     -9.3 -1228
                                  0.20
               7.4
          154
              7.7
                     -9.3 -1227
                                  1.19
          155
               7.7
                                  1.10
                     -9.3 - 1227
          154
          155
               7.4
                     -9.3 -1228
                                   0.52
  ... hidden reserved variables { '.chain', '.iteration', '.draw'}
  1 # gets the median and the 95% credible interval
  2 t(sapply(post[, 1:2], quantile, probs = c(0.025, 0.5, 0.975))
                  2.5%
                              50%
                                     97.5%
b Intercept 153.790176 154.620248 155.42834
sigma
                        7.758445
                                   8.36522
              7.189477
```



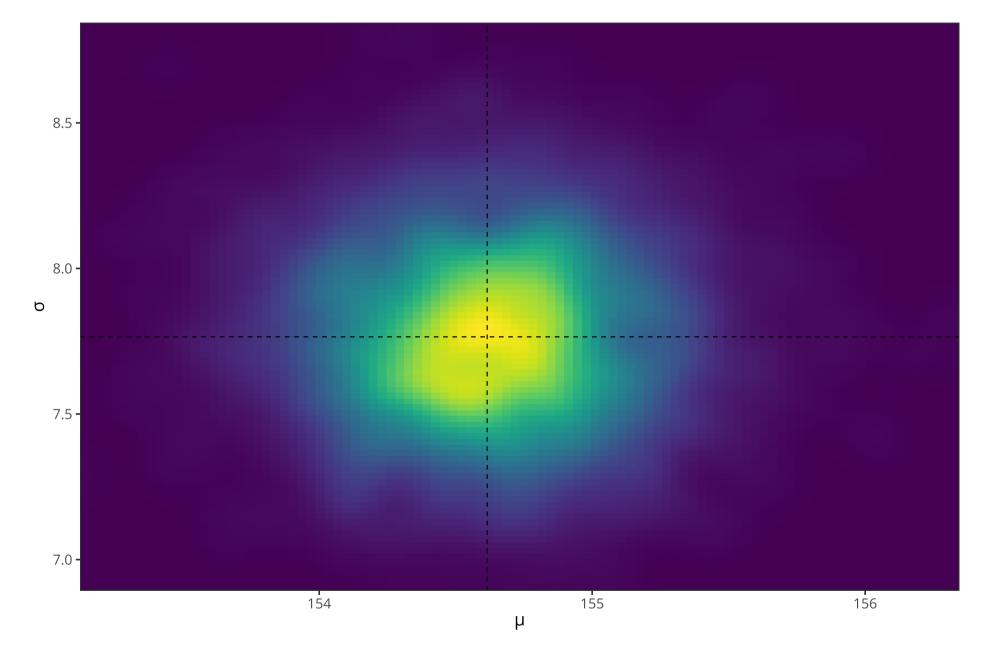
Visualiser la distribution postérieure

```
1 H.scv <- Hscv(post[, 1:2])
2 fhat_post <- kde(x = post[, 1:2], H = H.scv, compute.cont = TRUE)
3
4 plot(fhat_post, display = "persp", col = "purple", border = NA,
5     xlab = "\nmu", ylab = "\nsigma", zlab = "\np(mu, sigma)",
6     shade = 0.8, phi = 30, ticktype = "detailed",
7     cex.lab = 1.2, family = "Helvetica")</pre>
```





Visualiser la distribution postérieure

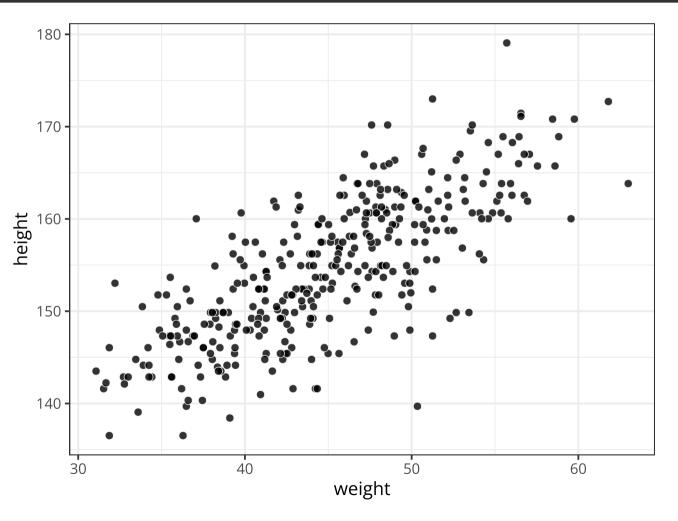




Ajouter un prédicteur

Comment est-ce que la taille co-varie avec le poids?

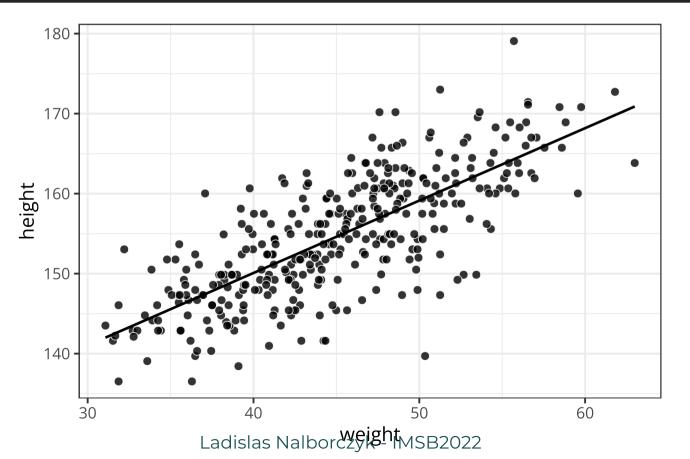
```
1 d2 %>%
2 ggplot(aes(x = weight, y = height) ) +
3 geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8)
```





$$h_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)$$

 $\mu_i = \alpha + \beta x_i$





Différentes notations

On considère un modèle de régression linéaire avec un seul prédicteur, une pente, un intercept, et des résidus distribués selon une loi normale. La notation :

$$h_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i$$
 avec $\epsilon_i \sim \text{Normal}(0, \sigma)$

est équivalente à :

$$h_i - (\alpha + \beta x_i) \sim \text{Normal}(0, \sigma)$$

et si on réduit encore un peu :

$$h_i \sim \text{Normal}(\alpha + \beta x_i, \sigma).$$

Les notations ci-dessus sont équivalentes, mais la dernière est plus flexible, et nous permettra par la suite de l'étendre plus simplement aux modèles multi-niveaux.



```
h_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)

\mu_i = \alpha + \beta x_i

\alpha \sim \text{Normal}(178, 20)

\beta \sim \text{Normal}(0, 10)

\sigma \sim \text{Exponential}(0.01)
```

Dans ce modèle μ n'est plus un paramètre à estimer (car μ est **déterminé** par α et β). À la place, nous allons estimer α et β .

Rappels : α est l'intercept, c'est à dire la taille attendue, lorsque le poids est égal à 0. β est la pente, c'est à dire le changement de taille attendu quand le poids augmente d'une unité.



```
priors <- c(
   prior(normal(178, 20), class = Intercept),
   prior(normal(0, 10), class = b),
   prior(exponential(0.01), class = sigma)
   )

mod4 <- brm(
   height ~ 1 + weight,
   prior = priors,
   family = gaussian(),
   data = d2
   )
</pre>
```



```
1 posterior summary(mod4)
                                              02.5
                                                            097.5
                 Estimate Est.Error
b Intercept
              113.8890577 1.85606722
                                       110.1498814
                                                      117.5807237
b weight
                0.9049617 0.04089134
                                         0.8237468
                                                        0.9871104
sigma
                                         4.7455662
                                                        5.5033403
                5.0997347 0.19666803
lprior
              -12.4807870 0.01575025
                                       -12.5121078
                                                      -12.4498495
            -1083.3414224 1.20407429 -1086.5553601 -1081.9651776
lp
```

- $\alpha = 113.89,95\%$ CrI [110.15,117.58] représente la taille moyenne quand le poids est égal à Okg...
- $\beta = 0.90, 95\%$ CrI [0.82, 0.99] nous indique qu'une augmentation de 1kg entraîne une augmentation de 0.90cm.



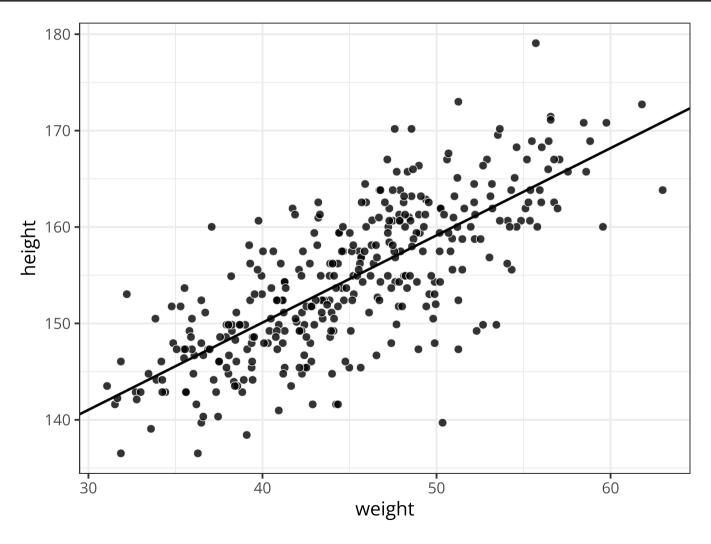
```
d2$weight.c <- d2$weight - mean(d2$weight)</pre>
  2
  3 mod5 <- brm(</pre>
      height ~ 1 + weight.c,
      prior = priors,
      family = gaussian(),
      data = d2
  8
  1 fixef(mod5) # retrieves the fixed effects estimates
                                                    097.5
             Estimate Est.Error
                                         02.5
Intercept 154.6031253 0.2737608 154.0670147 155.1436516
weight.c
            0.9063922 0.0419498
                                   0.8264103
                                                0.9903136
```

Après avoir centré la réponse, l'intercept représente désormais la valeur attendue de taille (en cm) lorsque le poids est à sa valeur moyenne.



Représenter les prédictions du modèle

```
1 d2 %>%
2    ggplot(aes(x = weight, y = height) ) +
3    geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4    geom_abline(intercept = fixef(mod4)[1], slope = fixef(mod4)[2], lwd = 1)
```





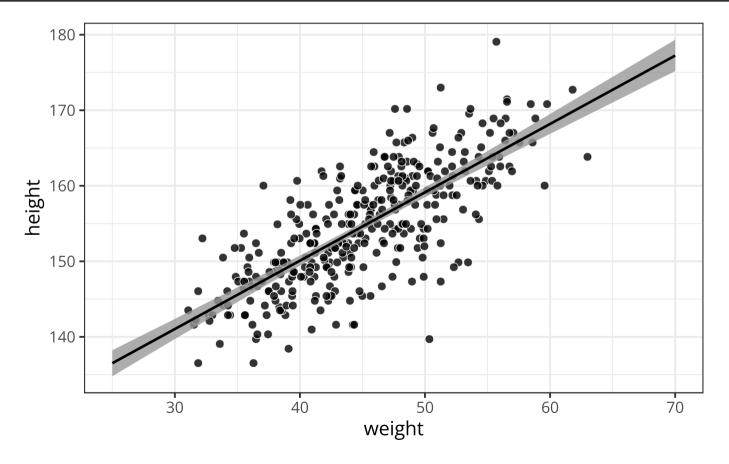
Représenter l'incertitude sur μ via fitted()

```
1 # on crée un vecteur de valeurs possibles pour "weight"
  2 weight.seq <- data.frame(weight = seq(from = 25, to = 70, by = 1) )</pre>
  4 # on récupère les prédictions du modèle pour ces valeurs de poids
  5 mu <- data.frame(fitted(mod4, newdata = weight.seq) ) %>% bind cols(weight.seq)
    # on affiche les 10 premières lignes de mu
  8 head(mu, 10)
   Estimate Est.Error
                          02.5
                                  097.5 weight
 136.5131 0.8572681 134.7868 138.2284
                                            25
  137.4181 0.8185231 135.7703 139.0651
                                            26
  138.3230 0.7799974 136.7587 139.8900
                                            27
                                            28
  139.2280 0.7417249 137.7519 140.7220
  140.1329 0.7037471 138.7301 141.5440
                                            29
  141.0379 0.6661144 139.7110 142.3806
                                            30
  141.9429 0.6288887 140.6854 143.2139
                                            31
  142.8478 0.5921467 141.6684 144.0537
                                            32
  143.7528 0.5559845 142.6534 144.8882
                                            33
10 144.6578 0.5205227 143.6219 145.7115
                                            34
```



Représenter l'incertitude sur μ via fitted()

```
1 d2 %>%
2  ggplot(aes(x = weight, y = height) ) +
3  geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4  geom_smooth(
5  data = mu, aes(y = Estimate, ymin = Q2.5, ymax = Q97.5),
6  stat = "identity",
7  color = "black", alpha = 0.8, size = 1
8  )
```





Intervalles de prédiction (incorporer σ)

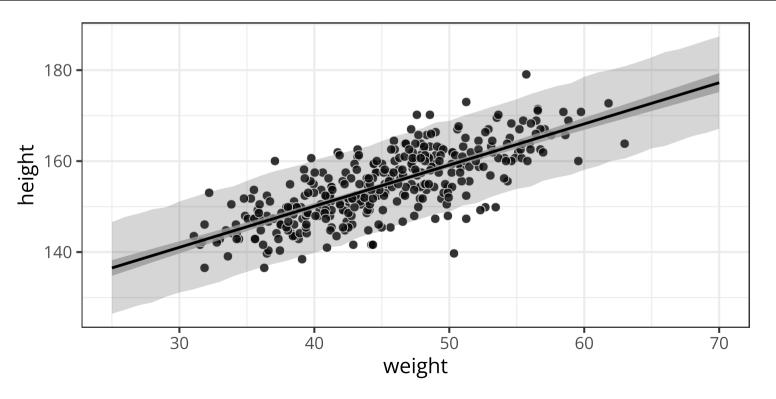
Pour rappel, voici notre modèle : $h_i \sim \text{Normal}(\alpha + \beta x_i, \sigma)$. Pour l'instant, on a seulement représenté les prédictions pour μ . Comment incorporer σ dans nos prédictions ?

```
1 # on crée un vecteur de valeurs possibles pour "weight"
 2 weight.seg <- data.frame(weight = seg(from = 25, to = 70, by = 1) )</pre>
  3
    # on récupère les prédictions du modèle pour ces valeurs de poids
    pred height <- data.frame(predict(mod4, newdata = weight.seq) ) %>% bind cols(weight.seq)
   # on affiche les 10 premières lignes de pred height
 8 head(pred height, 10)
   Estimate Est.Error
                         02.5
                                 097.5 weight
  136.4098 5.186568 126.4272 146.6054
                                            25
  137.3522 5.269245 127.3612 147.7474
                                            26
  138.2561 5.219190 128.3187 148.4856
                                            27
 139.3065 5.225907 128.9418 149.3919
                                            28
 140.1270 5.172048 130.1793 149.8614
                                           29
 141.0888 5.159174 131.1203 151.1209
                                            30
  141.8411 5.200899 131.7751 152.0549
                                            31
 142.8074 5.175875 132.6406 153.0057
                                            32
 143.8191 5.132382 133.4520 153.8159
                                            33
10 144.6263 5.051845 134.6868 154.4553
                                            34
```



Intervalles de prédiction (incorporer σ)

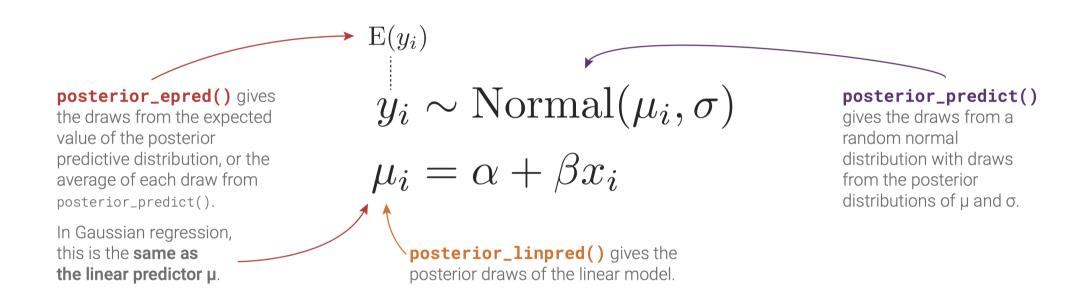
```
1 d2 %>%
2  ggplot(aes(x = weight, y = height)) +
3  geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4  geom_ribbon(
5  data = pred_height, aes(x = weight, ymin = Q2.5, ymax = Q97.5),
6  alpha = 0.2, inherit.aes = FALSE
7  ) +
8  geom_smooth(
9  data = mu, aes(y = Estimate, ymin = Q2.5, ymax = Q97.5),
10  stat = "identity", color = "black", alpha = 0.8, size = 1
11 )
```





Built-in brms functions

Le paquet brms propose aussi les fonctions posterior_epred(), posterior_linpred(), et posterior_predict(), qui permettent de générer des prédictions à partir de modèles fittés avc brms. Andrew Heiss décrit de manière détaillée le fonctionnement de ces fonction dans cet article de blog.





Rappel: Deux types d'incertitude

Deux sources d'incertitude dans le modèle : incertitude concernant l'estimation de la valeur des paramètres mais également concernant le processus d'échantillonnage.

Incertitude épistémique : La distribution a posteriori ordonne toutes les combinaisons possibles des valeurs des paramètres selon leurs plausibilités relatives.

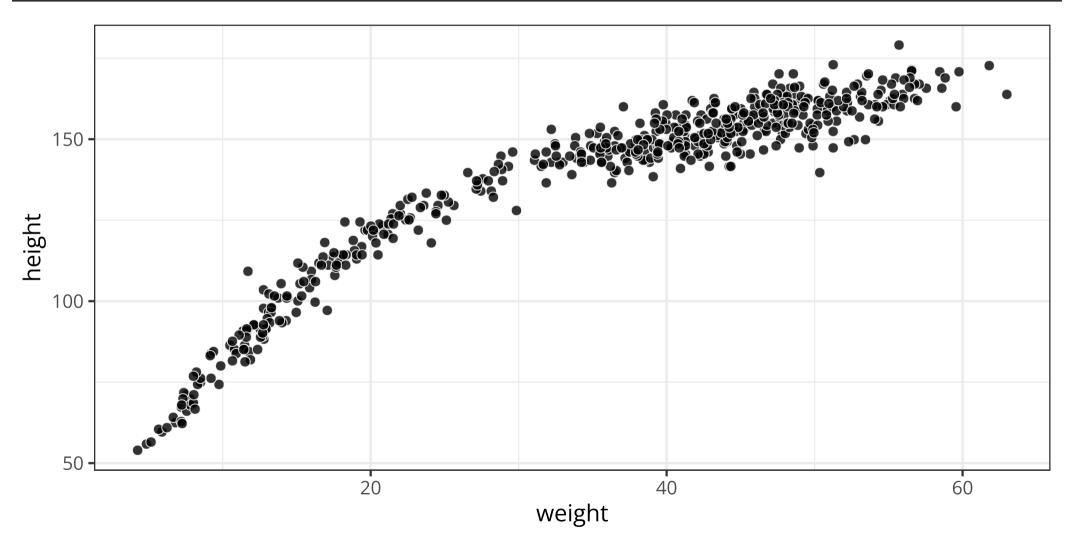
Incertitude aléatoire : La distribution des données simulées est elle, une distribution qui contient de l'incertitude liée à un processus d'échantillonnage (i.e., générer des données à partir d'une gaussienne).

Voir aussi ce court article par O'Hagan (2004).



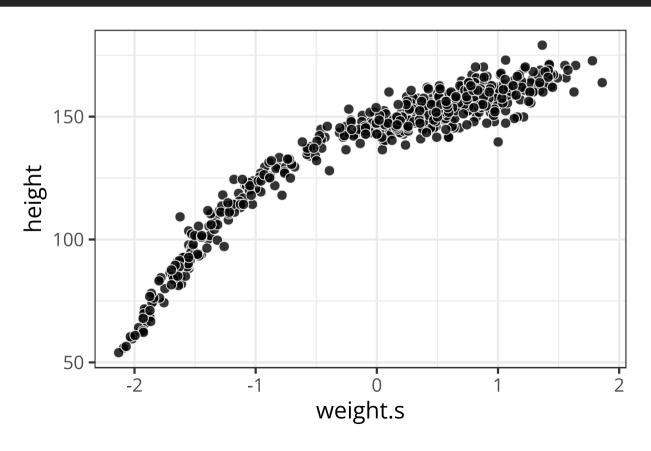
Régression polynomiale

```
1 d %>% # on utilise d au lieu de d2
2 ggplot(aes(x = weight, y = height) ) +
3 geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8)
```





Scores standardisés





Scores standardisés

Pourquoi standardiser les prédicteurs?

- **Interprétation**. Permet de comparer les coefficients de plusieurs prédicteurs. Un changement d'un écart-type du prédicteur correspond à un changement d'un écart-type sur la réponse (si la réponse est aussi standardisée).
- **Fitting**. Quand les prédicteurs contiennent de grandes valeurs (ou des valeurs trop différentes les unes des autres), cela peut poser des problèmes de convergence (cf. Cours n°05).



Modèle de régression polynomiale - Exercice

```
h_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)
\mu_i = \alpha + \beta_1 x_i + \beta_2 x_i^2
\alpha \sim \text{Normal}(156, 100)
\beta_1, \beta_2 \sim \text{Normal}(0, 10)
\sigma \sim \text{Exponential}(0.01)
```

À vous de construire et fitter ce modèle en utilisant brms::brm().



Modèle de régression polynomiale

```
1 priors <- c(</pre>
     prior(normal(156, 100), class = Intercept),
     prior(normal(0, 10), class = b),
 3
     prior(exponential(0.01), class = sigma)
   mod6 <- brm(</pre>
     # NB: polynomials should be written with the I() function...
     height ~ 1 + weight.s + I(weight.s^2),
 9
     prior = priors,
10
     family = gaussian(),
11
12
     data = d
13
```



Modèle de régression polynomiale

```
1 summary(mod6)
 Family: gaussian
 Links: mu = identity; sigma = identity
Formula: height ~ 1 + weight.s + I(weight.s^2)
   Data: d (Number of observations: 544)
  Draws: 4 chains, each with iter = 2000; warmup = 1000; thin = 1;
        total post-warmup draws = 4000
Population-Level Effects:
           Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
Intercept
            146.67
                         0.37 145.92 147.38 1.00
                                                        3849
                                                                 2603
weight.s
            21.40
                         0.29
                              20.85 21.97 1.00
                                                        3830
                                                                 2853
Iweight.sE2
                         0.28 -8.96 -7.85 1.00
              -8.41
                                                        3652
                                                                 2763
Family Specific Parameters:
     Estimate Est.Error 1-95% CI u-95% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                                     6.14 1.00
                                                           2518
sigma
         5.78
                   0.18
                            5.45
                                                  3838
Draws were sampled using sampling(NUTS). For each parameter, Bulk ESS
and Tail ESS are effective sample size measures, and Rhat is the potential
scale reduction factor on split chains (at convergence, Rhat = 1).
```



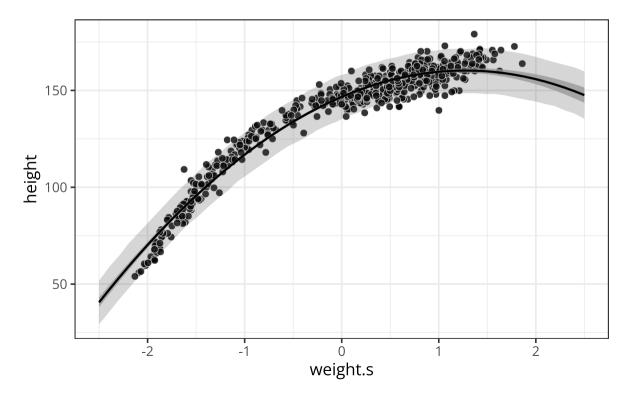
Représenter les prédictions du modèle

```
1 # on crée un vecteur de valeurs possibles pour "weight"
 2 weight.seg \leftarrow data.frame(weight.s = seg(from = -2.5, to = 2.5, length.out = 50))
 4 # on récupère les prédictions du modèle pour ces valeurs de poids
  5 mu <- data.frame(fitted(mod6, newdata = weight.seq) ) %>% bind cols(weight.seq)
    pred height <- data.frame(predict(mod6, newdata = weight.seq) ) %>% bind cols(weight.seq)
 8 # on affiche les 10 premières lignes de pred height
  9 head(pred height, 10)
                         02.5
                                  Q97.5 weight.s
  Estimate Est.Error
  40.57892 5.780568 29.22709 51.73450 -2.500000
  46.93764 5.888279 35.50626 58.64793 -2.397959
  53.19076 5.773016 41.89905 64.46848 -2.295918
  59.19972 5.999697 47.83277 71.07507 -2.193878
  65.25943 5.839142 53.87375 76.51191 -2.091837
  70.79875 5.846949 59.36606 81.99090 -1.989796
  76.30174 5.809967 64.98177 87.42384 -1.887755
  81.63006 5.810998 70.14310 92.92906 -1.785714
  86.69686 5.725256 75.74265 98.34396 -1.683673
10 91.86560 5.698405 80.90886 103.08358 -1.581633
```



Représenter les prédictions du modèle

```
1 d %>%
2    ggplot(aes(x = weight.s, y = height) ) +
3    geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4    geom_ribbon(
5     data = pred_height, aes(x = weight.s, ymin = Q2.5, ymax = Q97.5),
6     alpha = 0.2, inherit.aes = FALSE
7     ) +
8    geom_smooth(
9     data = mu, aes(y = Estimate, ymin = Q2.5, ymax = Q97.5),
10    stat = "identity", color = "black", alpha = 0.8, size = 1
11    )
```





Plusieurs méthodes pour calculer les tailles d'effet dans les modèles bayésiens. Gelman & Pardoe (2006) proposent une méthode pour calculer un \mathbb{R}^2 basé sur l'échantillon.

Marsman & Wagenmakers (2017) et Marsman et al. (2019) généralisent des méthodes existantes pour calculer un ρ^2 pour les designs de type ANOVA (i.e., avec prédicteurs catégoriels), qui représente une estimation de la taille d'effet dans la population (et non basée sur l'échantillon).

"

Similar to most of the ES measures that have been proposed for the ANOVA model, the squared multiple correlation coefficient ρ^2 [...] is a so-called proportional reduction in error measure (PRE). In general, a PRE measure expresses the proportion of the variance in an outcome y that is attributed to the independent variables x (Marsman et al., 2019).



$$\rho^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \pi_{i} (\beta_{i} - \beta)^{2}}{\sigma^{2} + \sum_{i=1}^{n} \pi_{i} (\beta_{i} - \beta)^{2}}$$

$$\rho^{2} = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \beta_{i}^{2}}{\sigma^{2} + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \beta_{i}^{2}}$$

$$\rho^{2} = \frac{\beta^{2} \tau^{2}}{\sigma^{2} + \beta^{2} \tau^{2}}$$

```
post <- as_draws_df(x = mod4)
beta <- post$b_weight
sigma <- post$sigma
rho <- beta^2 * var(d2$weight) / (sigma^2 + beta^2 * var(d2$weight) )</pre>
```

Attention, si plusieurs prédicteurs, dépend de la structure de covariance...



```
1 posterior plot(samples = rho, usemode = TRUE) + labs(x = expression(rho) )
                                                       mode = 0.57
                                                       91% HDI
                                   0.52
   0.45
                           0.50
                                                  0.55
                                                                         0.60
                                                                                                 0.65
```

1 summary(lm(height ~ weight, data = d2))\$r.squared

[1] 0.5696444

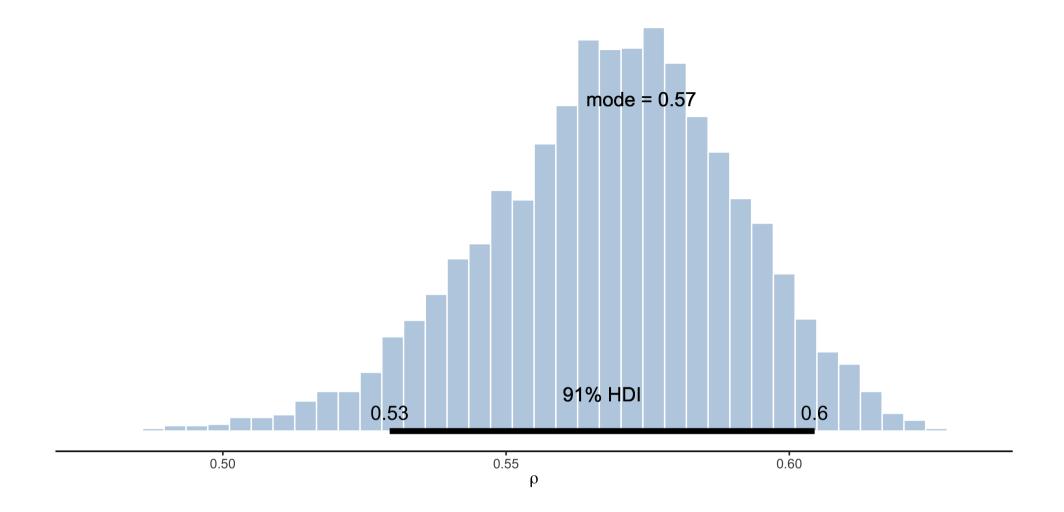


```
1 bayes_R2(mod4)

Estimate Est.Error Q2.5 Q97.5
R2 0.568312 0.02230833 0.5203817 0.6090215

1 bayes_R2(mod4, summary = FALSE)[, 1] %>%
2 posterior_plot(usemode = TRUE) +
3 labs(x = expression(rho))
```







Résumé du cours

On a présenté un nouveau modèle à deux puis trois paramètres : le modèle gaussien, puis la régression linéaire gaussienne, permettant de mettre en relation deux variables continues.

Comme précédemment, le théorème de Bayes est utilisé pour mettre à jour nos connaissances a priori quant à la valeur des paramètres en une connaissance a posteriori, synthèse entre nos priors et l'information contenue dans les données.

La package **brms** permet de fitter toutes sortes de modèles avec une syntaxe similaire à celle utilisée par lm().

La fonction fitted() permet de récupérer les prédictions d'un modèle fitté avec brms.

La fonction predict() permet de simuler des données à partir d'un modèle fitté avec brms.



Travaux pratiques - 1/2

Sélectionner toutes les lignes du jeu de données **howell** correspondant à des individus mineurs (age < 18). Cela devrait résulter en une dataframe de 192 lignes.

Fitter un modèle de régression linéaire en utilisant la fonction **brms::brm()**. Reporter et interpréter les estimations de ce modèle. Pour une augmentation de 10 unités de **weight**, quelle augmentation de taille (**height**) le modèle prédit-il ?

Faire un plot des données brutes avec le poids sur l'axe des abscisses et la taille sur l'axe des ordonnées. Surimposer la droite de régression du modèle et un intervalle de crédibilité à 89% pour la moyenne. Ajouter un intervalle de crédibilité à 89% pour les tailles prédites.

Que pensez-vous du "fit" du modèle ? Quelles conditions d'application du modèle seriez-vous prêt.e.s à changer, afin d'améliorer le modèle ?



Travaux pratiques - 2/2

Imaginons que vous ayez consulté une collègue experte en <u>allométrie</u> (i.e., les phénomènes de croissance différentielle d'organes) et que cette dernière vous explique que ça ne fait aucun sens de modéliser la relation entre le poids et la taille... alors qu'on sait que c'est le logarithme du poids qui est relié (linéairement) à la taille!

Modéliser alors la relation entre la taille (cm) et le log du poids (log-kg). Utiliser la dataframe howell en entier (les 544 lignes). Fitter le modèle suivant en utilisant brms::brm().

```
h_i \sim \text{Normal}(\mu_i, \sigma)

\mu_i = \alpha + \beta \cdot \log(w_i)

\alpha \sim \text{Normal}(178, 100)

\beta \sim \text{Normal}(0, 100)

\sigma \sim \text{Exponential}(0.01)
```

Où h_i est la taille de l'individu i et w_i le poids de l'individu i. La fonction pour calculer le log en R est simplement log(). Est-ce que vous savez interpréter les résultats ? Indice : faire un plot des données brutes et surimposer les prédictions du modèle...



Proposition de solution

```
1 # on garde seulement les individus ayant moins de 18 ans
2 d <- open data(howell) %>% filter(age < 18)</pre>
4 priors <- c(
     prior(normal(150, 100), class = Intercept),
     prior(normal(0, 10), class = b),
     prior(exponential(0.01), class = sigma)
 8
9
10 mod7 <- brm(
     height ~ 1 + weight,
11
12
     prior = priors,
13
     family = gaussian(),
     data = d
14
15
```



Proposition de solution

```
1 summary(mod7, prob = 0.89)
 Family: gaussian
  Links: mu = identity; sigma = identity
Formula: height ~ 1 + weight
   Data: d (Number of observations: 192)
  Draws: 4 chains, each with iter = 2000; warmup = 1000; thin = 1;
         total post-warmup draws = 4000
Population-Level Effects:
          Estimate Est.Error 1-89% CI u-89% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                                        60.47 1.00
Intercept
             58.20
                       1.40
                               55.92
                                                       4066
                                                                3128
weight
             2.72
                             2.61
                                       2.83 1.00
                        0.07
                                                       3954
                                                                2910
Family Specific Parameters:
      Estimate Est. Error 1-89% CI u-89% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
sigma
          8.53
                    0.45
                            7.83
                                     9.27 1.00
                                                   3781
                                                            2772
Draws were sampled using sampling(NUTS). For each parameter, Bulk ESS
and Tail ESS are effective sample size measures, and Rhat is the potential
scale reduction factor on split chains (at convergence, Rhat = 1).
```



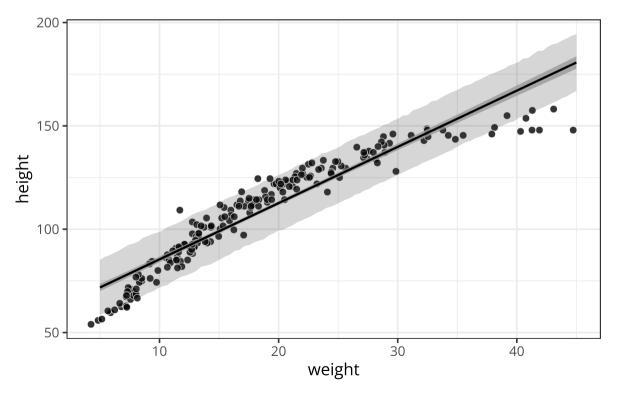
Représenter les prédictions du modèle

```
1 # on crée un vecteur de valeurs possibles pour "weight"
  2 weight.seg <- data.frame(weight = seg(from = 5, to = 45, length.out = 1e2) )</pre>
  3
  4 # on récupère les prédictions du modèle pour ces valeurs de poids
  5 mu <- data.frame(</pre>
      fitted(mod7, newdata = weight.seq, probs = c(0.055, 0.945))
      ) %>%
      bind cols(weight.seq)
  8
  9
    pred height <- data.frame(</pre>
 10
      predict(mod7, newdata = weight.seq, probs = c(0.055, 0.945) )
 11
      12
      bind cols(weight.seq)
 13
 14
 15 # on affiche les 6 premières lignes de pred height
 16 head(pred height)
  Estimate Est.Error
                         05.5
                                 094.5
                                         weight
1 71.66877 8.423002 58.55938 85.12889 5.000000
2 73.08458 8.607555 59.45684 86.61345 5.404040
3 73.74920 8.534452 60.15777 87.46164 5.808081
4 75.09736 8.569803 61.52997 88.58663 6.212121
5 76.33358 8.573160 62.58027 89.77716 6.616162
6 77.32169 8.525510 63.42130 91.10404 7.020202
```



Représenter les prédictions du modèle

```
1 d %>%
2    ggplot(aes(x = weight, y = height)) +
3    geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4    geom_ribbon(
5         data = pred_height, aes(x = weight, ymin = Q5.5, ymax = Q94.5),
6         alpha = 0.2, inherit.aes = FALSE
7         ) +
8    geom_smooth(
9         data = mu, aes(y = Estimate, ymin = Q5.5, ymax = Q94.5),
10         stat = "identity", color = "black", alpha = 0.8, size = 1
11    )
```





Proposition de solution

```
1 # on considère maintenant tous les individus
2 d <- open_data(howell)
3
4 mod8 <- brm(
5  # on prédit la taille par le logarithme du poids
6 height ~ 1 + log(weight),
7 prior = priors,
8 family = gaussian(),
9 data = d
10 )</pre>
```



Proposition de solution

```
1 summary(mod8, prob = 0.89)
 Family: gaussian
 Links: mu = identity; sigma = identity
Formula: height ~ 1 + log(weight)
   Data: d (Number of observations: 544)
  Draws: 4 chains, each with iter = 2000; warmup = 1000; thin = 1;
         total post-warmup draws = 4000
Population-Level Effects:
         Estimate Est.Error 1-89% CI u-89% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                       1.34 -25.80 -21.45 1.00
Intercept -23.58
                                                       3743
                                                                2855
logweight 47.02
                       0.39 46.40 47.65 1.00
                                                       3709
                                                                2819
Family Specific Parameters:
      Estimate Est. Error 1-89% CI u-89% CI Rhat Bulk ESS Tail ESS
                                     5.42 1.00
sigma
          5.16
                   0.16
                            4.92
                                                   3780
                                                            2869
Draws were sampled using sampling(NUTS). For each parameter, Bulk ESS
and Tail ESS are effective sample size measures, and Rhat is the potential
scale reduction factor on split chains (at convergence, Rhat = 1).
```



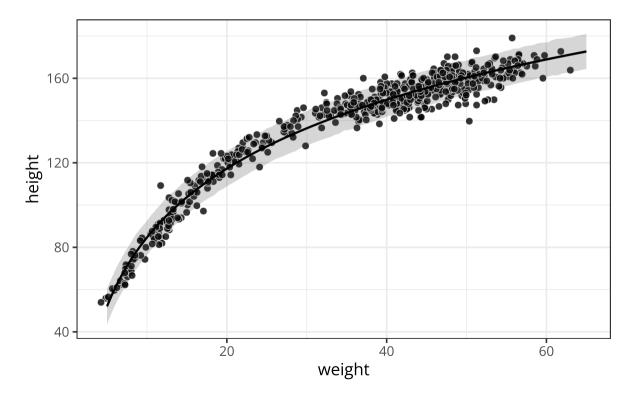
Représenter les prédictions du modèle

```
1 # on crée un vecteur de valeurs possibles pour "weight"
  2 weight.seg <- data.frame(weight = seg(from = 5, to = 65, length.out = 1e2) )</pre>
  3
  4 # on récupère les prédictions du modèle pour ces valeurs de poids
  5 mu <- data.frame(</pre>
      fitted(mod8, newdata = weight.seq, probs = c(0.055, 0.945))
      ) %>%
      bind cols(weight.seq)
  8
  9
    pred height <- data.frame(</pre>
 10
      predict(mod8, newdata = weight.seq, probs = c(0.055, 0.945) )
 11
      12
      bind cols(weight.seq)
 13
 14
 15 # on affiche les 6 premières lignes de pred height
 16 head(pred height)
  Estimate Est.Error
                         05.5
                                 094.5
                                         weight
1 52.02360 5.320630 43.55784 60.56774 5.000000
2 57.53741 5.100738 49.31835 65.68519 5.606061
3 62.47234 5.196777 54.19279 70.69335 6.212121
4 66.74357 5.256288 58.36315 74.89908 6.818182
5 70.61061 5.189019 62.46373 78.88959 7.424242
6 74.32148 5.123331 66.33714 82.59116 8.030303
```



Représenter les prédictions du modèle

```
1 d %>%
2    ggplot(aes(x = weight, y = height)) +
3    geom_point(colour = "white", fill = "black", pch = 21, size = 3, alpha = 0.8) +
4    geom_ribbon(
5     data = pred_height, aes(x = weight, ymin = Q5.5, ymax = Q94.5),
6     alpha = 0.2, inherit.aes = FALSE
7     ) +
8    geom_smooth(
9     data = mu, aes(y = Estimate, ymin = Q5.5, ymax = Q94.5),
10    stat = "identity", color = "black", alpha = 0.8, size = 1
11    )
```





Références

- Bürkner, P.-C. (2017). **brms**: An *R* Package for Bayesian Multilevel Models Using *Stan. Journal of Statistical Software*, 80(1). https://doi.org/10.18637/jss.v080.i01
- Gelman, A., & Pardoe, I. (2006). Bayesian measures of explained variance and pooling in multilevel (hierarchical) models. *Technometrics*, 48(2), 241–251. https://doi.org/10.1198/004017005000000517
- Marsman, M., & Wagenmakers, E.-J. (2017). Three Insights from a Bayesian Interpretation of the One-Sided *P* Value. *Educational and Psychological Measurement*, 77(3), 529–539. https://doi.org/10.1177/0013164416669201
- Marsman, M., Waldorp, L., Dablander, F., & Wagenmakers, E.-J. (2019). Bayesian estimation of explained variance in ANOVA designs. *Statistica Neerlandica*, *O*(0), 1–22. https://doi.org/10.1111/stan.12173
- O'Hagan, T. (2004). Dicing with the unknown. *Significance*, 1(3), 132–133. https://doi.org/10.1111/j.1740-9713.2004.00050.x

