Bayesiánská analýza

III. Normální lineární regresní model s přirozeně konjugovanou apriorní hustotou (více vysvětlujících proměnných)

Obsah tématu

Úvod

- Koop (2003) – kapitola 3
- Normální lineární regresní model s více vysvětlujícími proměnnými.
- Použití maticové algebry.
- Přirozeně konjugovaný prior $\Rightarrow$ analytické výsledky (podobně jako u modelu s jedinou vysvětlující proměnnou).

Obsah tématu

LRM v maticovém vyjádření I

- k vysvětlujících proměnných $x_{i1}, \ldots, x_{ik}$ pro $i = 1, \ldots, N$ a model:

$$y_i = \beta_1 + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_k x_{ik} + \epsilon_i.$$

- Úrovňová konstanta: $x_{i1} = 1$.
- Vektory $N \times 1$ a $k \times 1$:

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ y_N \end{bmatrix} \quad \epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \epsilon_N \end{bmatrix} \quad \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \beta_k \end{bmatrix}$$

LRM v maticovém vyjádření II

- Matice vysvětlujících proměnných rozměru $N \times k$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{12} & \cdot & \cdot & x_{1k} \\ 1 & x_{22} & \cdot & \cdot & x_{2k} \\ \cdot & \cdot & \cdot\cdot & \cdot & \\ \cdot & \cdot & \cdot\cdot & \cdot & \\ 1 & x_{N2} & \cdot & \cdot & x_{Nk} \end{bmatrix}$$

- Regresní model:

$$y = X\beta + \epsilon.$$

Předpoklady

- Předpoklady o ϵ a X determinují formu věrohodnostní funkce.
- Klasické předpoklady (později uvolněny):
  1. $\epsilon \sim N(0_N, h^{-1} I_N)$, kde $h = \sigma^{-2}$;
  2. všechny prvky X jsou nenáhodné veličiny.

Obsah tématu

Věrohodnostní funkce I

- Věrohodnostní funkce s využitím OLS odhadů:

$$\nu = N - k,$$
$$\widehat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y,$$
$$s^2 = \frac{(y - X\widehat{\beta})'(y - X\widehat{\beta})}{\nu}.$$

Věrohodnostní funkce II

- Věrohodnostní funkce:

$$p(y|\beta,h) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}\left\{h^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{h}{2}(\beta-\widehat{\beta})'X'X(\beta-\widehat{\beta})\right]\right\}$$
$$\times\left\{h^{\frac{\nu}{2}}\exp\left[-\frac{h\nu}{2s^{-2}}\right]\right\}.$$

Apriorní hustota

- Normální-gama rozdělení, kdy $\beta|h$ z vícerozměrného normálního rozdělení, h je stále z gama rozdělení:

$$\beta|h \sim N(\underline{\beta}, h^{-1}\underline{V}),$$
$$h \sim G(\underline{s}^{-2}, \underline{\nu}.)$$

- Přirozeně konjugovaný prior pro β a h:

$$\beta, h \sim NG(\underline{\beta}, \underline{V}, \underline{s}^{-2}, \underline{\nu}).$$

- $\underline{\beta}$: k-rozměrný vektor apriorních středních hodnot pro k regresních koeficientů, $\beta_1, \ldots, \beta_k$.
- $\underline{V}$: je pozitivně definitní apriorní část kovarianční matice rozměru $k \times k$.

Obsah tématu

Posterior I

- Posteriorní hustota – proporcionální součinu věrohodnostní funkce a apriorní hustoty
- Obdobné NLRM s jedinou vysvětlující proměnnou (použití matic).
- Posteriorní hustota parametrů:

$$\beta, h|y \sim NG(\overline{\beta}, \overline{V}, \overline{s}^{-2}, \overline{\nu}).$$

- Přičemž platí:

$$\begin{aligned}
\overline{V} &= (\underline{V}^{-1} + X'X)^{-1}, \\
\overline{\beta} &= \overline{V}(\underline{V}^{-1}\underline{\beta} + X'X\widehat{\beta}), \\
\overline{\nu} &= \underline{\nu} + N.
\end{aligned}$$

- $\overline{s}^{-2}$ je implicitně definováno následovně:

$$\overline{\nu s}^2 = \underline{\nu s}^2 + \nu s^2 + (\widehat{\beta} - \underline{\beta})'[\underline{V} + (X'X)^{-1}](\widehat{\beta} - \underline{\beta}).$$

Vlastnosti posteriorní hustoty I

- Marginální posteriorní hustota pro β má vícerozměrné t-rozdělení:

$$\beta|y \sim t(\overline{\beta}, \overline{s}^2\overline{V}^2, \overline{\nu}).$$

- Z definice t-rozdělení:

$$E(\beta|y) = \overline{\beta},$$
$$var(\beta|y) = \frac{\overline{\nu s}^2}{\overline{\nu} - 2}\overline{V}.$$

Vlastnosti posteriorní hustoty II

- Platí intuice z NLRM s jednou vysvětlující proměnnou (jen vektory resp. matice).
- $\widehat{\beta}$ je vektor.
- Matice $(X'X)^{-1}$: podobná role jako skalár $\frac{1}{\sum x_i^2}$ v jednoduchém LRM.
- $\overline{V}$: matice rozměru $k \times k$.
- Posteriorní střední hodnota parametru β, $\overline{\beta}$: maticově vážený průměr apriorní a datové informace.

Neinformativní prior I

- Nastavení $\underline{\nu} = 0$ a $\underline{V}^{-1}$ „blížící“ se hodnotou k nule.
- Obvykle $\underline{V}^{-1} = cI_k$, kde c je skalár blížící se nule.
- Nepravá apriorní hustota:

$$p(\beta, h) \propto \frac{1}{h}.$$

Neinformativní prior II

- Získáme OLS odhady:

$$\beta, h|y \sim NG(\overline{\beta}, \overline{V}, \overline{s}^{-2}, \overline{\nu}),$$

kde

$$\begin{aligned}
\overline{V} &= (X'X)^{-1}, \\
\overline{\beta} &= \widehat{\beta}, \\
\overline{\nu} &= N, \\
\overline{\nu s}^2 &= \nu s^2.
\end{aligned}$$

Obsah tématu

Omezení ve tvaru nerovnosti

- Předpokládáme omezení ve tvaru nerovnosti:

$$R\beta \geq r.$$

- R je známá matice rozměru $J \times k$ a r je známý J-rozměrný vektor.
- Porovnáváme dva modely:

$$M_1 : R\beta \geq r,$$

$$M_2 : R\beta \ngeq r.$$

- Značení v definici M_2 znamená, že jedno nebo více z J omezení v M_1 není splněno.

Posteriorní podíl šancí I

- Snadný výpočet posteriorního podílu šancí, použití neinformativních priorů není problém:

$$PO_{12} = \frac{p(M_1|y)}{p(M_2|y)} = \frac{p(R\beta \geq r|y)}{p(R\beta \ngeq r|y)}.$$

- Posteriorní hustota pravděpodobnosti pro β je z vícerozměrného t-rozdělení $\Rightarrow$ $p(R\beta|y)$ je z vícerozměrného t-rozdělení.

Omezení ve tvaru rovnosti

- **Případ 1**: M_1 obsahující omezení $R\beta = r$ a M_2, u kterého toto omezení neplatí (vnořené modely – nested models).
- **Případ 2**: $M_1 : y = X_1\beta_{(1)} + \epsilon_1$ vzhledem k $M_2 : y = X_2\beta_{(2)} + \epsilon_2$, kde X_1 a X_2 jsou matice obsahující i různé vysvětlující proměnné (nevnořené modely – non-nested).
- Oba případy v definicí modelů pro $j = 1, 2$:

$$M_j : y_j = X_j\beta_{(j)} + \epsilon_j.$$

- Porovnání nevnořených modelů zahrnuje $y_1 = y_2$
- Porovnání vnořených modelů definuje M_2 jako neomezenou regresi a M_1 obsahuje omezení $R\beta = r$ (vyžaduje předefinování vysvětlované a vysvětlujících proměnných).

Posteriorní podíl šancí II

- Posteriorní podíl šancí – využití marginálních věrohodností.
- Marginální věrohodnost:

$$p(y_j|M_j) = c_j \left(\frac{|\overline{V}_j|}{|\underline{V}_j|} \right)^{\frac{1}{2}} (\overline{\nu}_j \overline{s}_j^2)^{-\frac{\overline{\nu}_j}{2}},$$

pro $j = 1, 2$, kde

$$c_j = \frac{\Gamma\left(\frac{\overline{\nu}_j}{2}\right) (\underline{\nu}_j \underline{s}_j^2)^{\frac{\underline{\nu}_j}{2}}}{\Gamma\left(\frac{\underline{\nu}_j}{2}\right) \pi^{\frac{N}{2}}}$$

Posteriorní podíl šancí III

- Posteriorní podíl šancí porovnávající M_1 s M_2:

$$PO_{12} = \frac{c_1 \left(\frac{|\overline{V}_1|}{|\underline{V}_1|} \right)^{\frac{1}{2}} (\overline{\nu}_1 \overline{s}_1^2)^{-\frac{\overline{\nu}_1}{2}} p(M_1)}{c_2 \left(\frac{|\overline{V}_2|}{|\underline{V}_2|} \right)^{\frac{1}{2}} (\overline{\nu}_2 \overline{s}_2^2)^{-\frac{\overline{\nu}_2}{2}} p(M_2)}.$$

- Posteriorní podíl šancí závisí na apriorním podílu šancí, zvýhodňuje soulad modelu s daty, koherenci mezi apriorní a datovou informací a šetrnost pokud jde o počet vysvětlujících proměnných.

Porovnání modelů – neinformativní priory

- Neformální pravidlo: *použití neinformativních priorů pro společné parametry a čistě informativní priory pro všechny ostatní parametry*.
- Nastavením $\underline{\nu}_1 = \underline{\nu}_2 = 0$: posteriorní podíl šancí má rozumnou interpretaci (soulad modelu s daty, koherenci mezi apriorní a datovou informací, atd.)
- Rozumné užití neinformativního prioru pro přesnost chyby.
- Užití neinformativního prioru pro $\beta_{(j)}$ – vážné problémy v případě $k_1 \neq k_2$.
- Neinformativní prior pro $\beta_{(j)}$ založený na $\underline{V}_j^{-1} = cI_{kj}$ a $c \to 0$. $|\underline{V}_j| = \frac{1}{c^{k_j}}$ se vzájemně nevyruší.
- Jesliže $k_1 < k_2$, PO_{12} je nekonečno, v případě $k_2 > k_1$, PO_{12} se blíží k nule bez ohledu na data.

Obsah tématu

Přípustné intervaly

- Volná analogie ke konfidenčním intervalům (testování hypotéz).
- Definice pro jediný regresní koeficient β_j.
- 95% přípustný interval pro β_j je interval $[a, b]$ takový že:

$$p(a \leq \beta_j \leq b|y) = 0.95.$$

- Existuje nekonečně mnoho přípustných intervalů.
- Např. $\beta_j|y \sim N(0, 1) \Rightarrow$ 95% přípustné intervaly $[-1.96, 1.96]$, $[-1.75, 2.33]$, $[-1.64, \infty]$ atd.

Highest Posterior Density Intervals

- 95% HPDI je 95% přípustný interval, který má nejmenší rozsah oproti jekémukoliv jinému 95% přípustnému intervalu.
- Např. $[-1.96, 1.96]$ je nejkratší přípustný interval.
- HPDI existuje vždy, když existuje posteriorní hustota pravděpodobnosti.
- Lze jej využít i při neinformativním prioru.

Obsah tématu

Prediční hustota

- Chceme předpovědět:
$$y^* = X^*\beta + \epsilon^*.$$
- Předpověď je založena na:
$$p(y^*|y) = \iint p(y^*|y, \beta, h)p(\beta, h|y)d\beta dh.$$
- Lze ukázat:
$$y^*|y \sim t(X^*\overline{\beta}, \overline{s}^2\{I_T + X^*\overline{V}X^{*\prime}\}, \overline{\nu}).$$

Obsah tématu

Monte Carlo integrace pro NLRM

- Porovnání modelů, predikci a posteriorní analýzu týkající se β lze provést analyticky (netřeba posteriorních simulátorů).

Theorem (Monte Carlo integrace)

Nechť $\beta^{(s)}$ *pro* $s = 1, \ldots, S$ *je náhodný výběr (vzorek) z* $p(\beta|y)$ *a* $g(\cdot)$ *je funkce a definujme*

$$\widehat{g}_S = \frac{1}{S}\sum_{s=1}^{S} g(\beta^{(s)}),$$

potom $\widehat{g}_S$ *konverguje k* $E[g(\beta)|y]$ *pro* S *jdoucí k nekonečnu.*

Algoritmus

1. Vygenerujeme náhodný výběr $\beta^{(s)}$ z posteriorní hustoty pro β použitím generátoru náhodných čísel pro vícerozměrné t-rozdělení.
2. Spočítáme $g(\beta^{(s)})$ a zachováme tento výsledek.
3. Opakujeme předchozí kroky S-krát.
4. Spočítáme průměr S náhodných výběrů $g(\beta^{(1)}), \ldots, g(\beta^{(S)})$.

Těmito kroky získáme odhad $E[g(\beta)|y]$ pro jakoukoliv funkci parametrů, která nás zajímá.

Numerická standardní chyba

- Monte Carlo integrace: aproximace $E[g(\beta)|y]$ (volbou S řídíme velikost chyby aproximace).
- Číselné měřítko chyby aproximace – využitím centrální limitní věty:

$$\sqrt{S}\left\{\widehat{g}_S - E[g(\beta)|y]\right\} \to N(0, \sigma_g^2),$$

pro S jdoucí k nekonečnu, přičemž $\sigma_g^2 = var[g(\beta)|y]$.

- Aproximativní 95% konfidenční interval pro $E[g(\beta)|y]$

$$\left[\widehat{g}_S - 1.96\frac{\widehat{\sigma}_g}{\sqrt{S}}, \widehat{g}_S + 1.96\frac{\widehat{\sigma}_g}{\sqrt{S}}\right].$$

- Alternativně lze využít i numerickou standardní chybu (NSE) $\frac{\widehat{\sigma}_g}{\sqrt{S}}$ (obsahuje stejnou informaci v kompaktnější podobě).

Obsah tématu

Reálná data

- Reálná data o prodejích domů ve Windsdoru, Kanada v roce 1987, $N = 546$.
- Proměnné:
  - y_i = prodejní cena i-tého domu (v Kanadských dolarech),
  - x_{i2} = rozloha i-tého domu (ve čtverečních stopách),
  - x_{i3} = počet ložnic v i-tém domě,
  - x_{i4} = počet koupelen v i-tém domu,
  - x_{i5} = počet pater v i-tém domu.
- Hlavní soubory *chapter03.m* + skript *chapter03_neinf.m* + řada dalších podpůrných funkcí.

Reálná data

- Předpokládámě vliv rozlohy mezi 0 a 20 dolary za stopu čtvereční $\Rightarrow$ $var(\beta_2) = 25$; pro ostatní koeficienty volíme $var(\beta_3) = 2500^2$ a $var(\beta_4) = var(\beta_5) = 5000^2$.

$$var(\beta) = \frac{\underline{\nu} \underline{s}^2}{\underline{\nu} - 2} \underline{V}.$$

- „Téměř“ neinformativní prior a informativní prior s $\underline{s}^{-2} = 4.0 \times 10^{-8}$, $\underline{\nu} = 5$ a

$$\underline{\beta} = \begin{bmatrix} 0.0 \\ 10 \\ 5000 \\ 10000 \\ 10000 \end{bmatrix} \quad \underline{V} = \begin{bmatrix} 2.40 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 6.0 \times 10^{-7} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.15 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.60 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.60 \end{bmatrix}.$$

Apriorní a posteriorní střední hodnoty pro β (směrodatné odchylky v závorkách)

	Prior	Posterior	
	Informativní	(Inf. prior)	(Neinf. prior)
β_1	0	−4035.05	−4009.55
	(10000)	(3530.16)	(3590.11)
β_2	10	5.43	5.43
	(5)	(0.37)	(0.37)
β_3	5000	2886.81	2824.61
	(2500)	(1184.93)	(1210.43)
β_4	10000	16965.24	17105.18
	(5000)	(1708.02)	(1728.18)
β_5	10000	7641.23	7634.90
	(5000)	(997.02)	(1004.34)

Apriorní a posteriorní střední hodnoty pro h (směrodatné odchylky v závorkách)

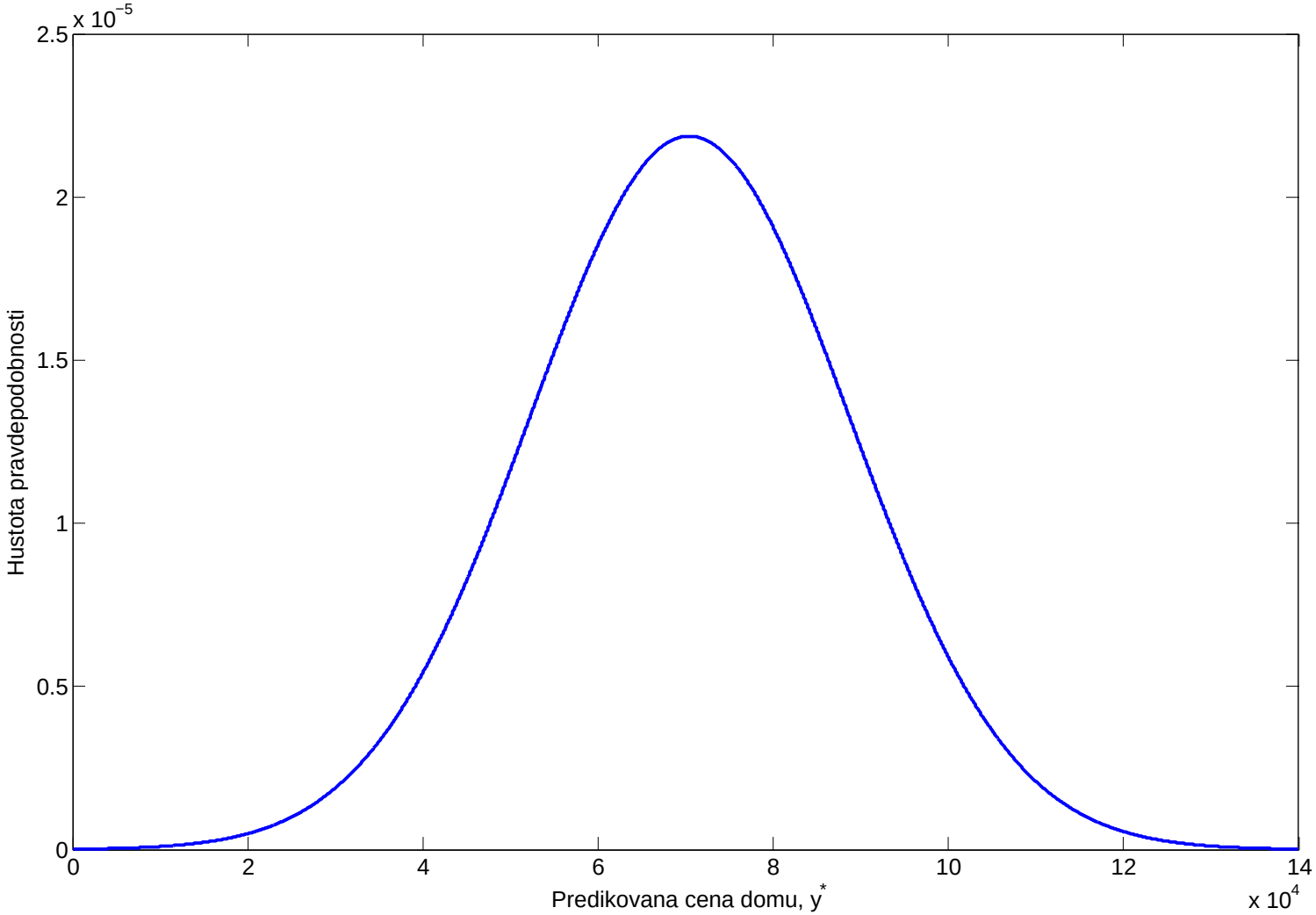
	Prior	Posterior	
	Informativní	(Inf. prior)	(Neinf. prior)
Stř. hodnota	4×10^{-8}	3.05×10^{-9}	3.03×10^{-9}
Sm. odchylka	2.53×10^{-8}	1.84×10^{-10}	1.83×10^{-10}

Porovnání modelů zahrnující parametr β

	$p(\beta_j > 0 \mid y)$	95% HPDI	99% HPDI	Post. podíl šancí pro $\beta_j = 0$
		Informativní apriorní hustota		
β_1	0.13	[-10969.27,2899.17]	[-13159.75,5089.64]	4.14
β_2	1.00	[4.71,6.15]	[4.49,6.38]	0.00
β_3	0.99	[559.29,5214.34]	[-175.96,5949.58]	0.39
β_4	1.00	[13610.20,20320.27]	[12550.37,21380.10]	0.00
β_5	1.00	[5682.82,9599.65]	[5064.16,10218.30]	0.00
		*Neinformativní apriorní hustota**		
β_1	0.13	[-11061.65,3042.54]	[-13289.45,5270.34]	—
β_2	1.00	[4.71,6.15]	[4.48,6.38]	—
β_3	0.99	[446.96,5202.27]	[-304.15,5953.38]	—
β_4	1.00	[13710.50,20499.85]	[12638.10,21572.25]	—
β_5	1.00	[5662.07,9607.73]	[5038.84,10230.96]	—

* Jako neinformativní apriorní hustota byla použita apriorní hustota blížící se čistě neinformativní hustotě. Podíl šancí tak bylo možno spočítat, ale není zde uváděn.

Predikční hustota pro dům o rozloze 5000 čtverečních stop.



Posteriorní výsledky pro parametr β_2 spočítané alternativním způsobem

	Stř. hodnota	Směrodatná odchylka	NSE
Analyticky	5.43	0.37	—
Počet replikací			
$S = 10$	5.44	0.27	0.085
$S = 100$	5.43	0.38	0.038
$S = 1000$	5.44	0.36	0.011
$S = 10000$	5.44	0.36	0.004
$S = 100000$	5.43	0.37	0.001