

Modelo Lineal de Regresión

Aprendizaje Automático INF-398 II-2021

Ricardo Ñanculef

UTFSM Campus San Joaquín

Table of contents

1. Regresión en el Modelo Supervisado
2. Entrenamiento del Modelo Lineal
3. ¿Porqué o Cuándo usar la Función de Pérdida Cuadrática?
4. Inferencias Clásicas sobre el Modelo Lineal

Regresión en el Modelo Supervisado

Modelo Supervisado

Dados un espacio de entrada \mathbb{X} , un espacio de salida \mathbb{Y} , una función de pérdida (loss) $L : \mathbb{Y} \times \mathbb{Y} \rightarrow \mathbb{R}$, y un conjunto de ejemplos

$S = \{(x^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^n \subset \mathbb{X} \times \mathbb{Y}$, un problema de aprendizaje supervisado consiste en encontrar una función $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y}$ que minimice *el valor esperado del error predicción*:

$$R(f) = \mathbb{E}(L(f(x), y)) = \sum_{x,y} L(f(x), y)p(x, y) . \quad (1)$$

Notemos que acá, $p(x, y)$ es la función de probabilidad sobre $\mathbb{X} \times \mathbb{Y}$ con la cuál se generan los ejemplos.

Si no genera confusión escribiremos $\sum_{x,y} L(f(x), y)p(x, y)$ en vez de $\int L(f(x), y)dP(x, y)$ con el fin de hacer la notación más intuitiva.

En general, llamaremos regresión a cualquier problema en que \mathbb{Y} es continuo y denso en \mathbb{R}^o .

Ejemplos

- Predecir, con 7 días de anticipación, la velocidad del viento en un determinado punto donde funciona un parque eólico: $o = 3$.
- Determinar el precio de venta de una casa a partir de ciertos atributos que describen la propiedad: $o = 1$.
- Determinar el número de personas en una imagen (?): $o = 1$.

Por simplicidad, asumiremos en adelante que $o = 1$.

Modelo Lineal de Regresión

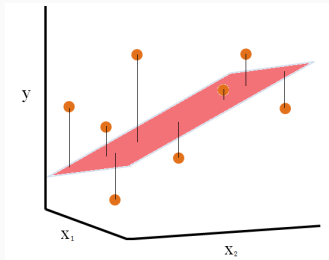
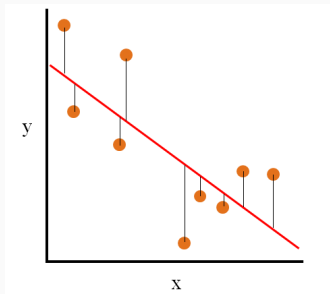
Asumiendo $\mathbb{X} \subset \mathbb{R}^d$, un método muy simple para abordar problemas de regresión consiste en elegir como espacio de hipótesis al espacio de todas las “líneas” en \mathbb{R}^d y adoptar la **función de pérdida cuadrática** (*quadratic loss*),

$$L(f(x), y) = (f(x) - y)^2. \quad (2)$$

Modelo Lineal de Regresión

El espacio de las “líneas” en \mathbb{R}^d , es el conjunto de todas las funciones de la forma

$$f(x; \beta) = \sum_{i=1}^d \beta_i x_i + \beta_0 = \beta^T x + \beta_0, \quad (3)$$



Modelo Lineal de Regresión

Los valores de $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_d$ se denominan los **parámetros del modelo**: permiten identificar una línea dentro de \mathcal{H} .

En un modelo de esta forma, nuestra estimación de y se construye “pesando” los distintos atributos que hayamos decidido utilizar para representar x , es decir, sumando los efectos obtenidos de cada uno de los predictores:

$$f(x; \beta) = \sum_{i=1}^d \beta_i x_i + \beta_0 = \beta^T x + \beta_0. \quad (4)$$

La constante β_0 en el modelo $f(x) = \beta^T x + \beta_0$, se denomina **intercepto** y se puede interpretar como el valor de y cuando $x = 0$.

Modelo Lineal de Regresión

Notemos que el modelo $f(x) = \beta^T x + \beta_0$ es lineal en β y lineal y x .

Sin embargo, si los datos disponibles (antes de la representación en \mathbb{X}), son de la forma $\{(z^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^n$, el modelo podría no ser lineal en z (los atributos originales).

Entrenamiento del Modelo Lineal

En la formulación clásica, el entrenamiento del modelo lineal se traduce en encontrar $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ de modo de minimizar

$$J(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y^{(i)} - f(x^{(i)}))^2. \quad (5)$$

Notemos que esta función objetivo se obtiene al adoptar el riesgo empírico como principio de inducción con la pérdida cuadrática $L(f(x), y) = (f(x) - y)^2$.

Possible overfitting! Depende de la complejidad del espacio de hipótesis relativa al número de ejemplos disponibles.

Para minimizar

$$J(\beta) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y^{(i)} - f(x^{(i)}))^2 \propto \hat{R}(f), \quad (6)$$

podemos buscar puntos críticos de J y chequear que se trata de un mínimo. Esto implica resolver el sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial J}{\partial \beta_i} = 0 \quad \forall i = 0, \dots, d. \quad (7)$$

Para resolver ese sistema, es conveniente expresar el problema matricialmente ..

- Las respuestas deseadas $\{y^{(i)}\}_{i=1}^n$ se organizan como filas de una matriz $Y \in \mathbb{R}^{n \times 1}$.
- Las incógnitas $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$ se organizan en un vector $\underline{\beta} \in \mathbb{R}^{d+1}$.
- Los ejemplos de entrada $\{x^{(i)}\}_{i=1}^n$ se expanden en una dimensión, definiendo $\underline{x}^{(i)} = (x^{(i)}, 1)$.
- Los ejemplos $\{\underline{x}^{(i)}\}_{i=1}^n$ se organizan como filas de una matriz $X \in \mathbb{R}^{n \times d+1}$ denominada **matriz de diseño**.

Por comodidad definimos $p = d + 1$.

Con esas definiciones, las predicciones del modelo correspondientes a los ejemplos $\{x^{(i)}\}_{i=1}^n$ se pueden obtener como

$$\hat{Y} = X\underline{\beta}. \quad (8)$$

La función objetivo toma entonces la forma,

$$J(\underline{\beta}) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}} = \frac{1}{2} \|\hat{Y} - Y\|^2 = (X\underline{\beta} - Y)^T (X\underline{\beta} - Y), \quad (9)$$

con $\hat{\mathbf{e}} = \hat{Y} - Y$.

Con esta notación encontrar los puntos críticos de $J(\underline{\beta})$ es sencillo ...

En efecto,

$$\frac{\partial J}{\partial \underline{\beta}} = X^T (X \underline{\beta} - Y) \quad (10)$$

$$\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{x}$$

$$\frac{\partial \mathbf{A} \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^T$$

Asumiendo $X^T X \in \mathbb{R}^{p \times p}$ invertible, tenemos entonces que

$$\frac{\partial J}{\partial \underline{\beta}} = 0 \Leftrightarrow X^T (X \underline{\beta} - Y) = 0 \Leftrightarrow \underline{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (11)$$

Además,

$$\frac{\partial^2 J}{\partial \underline{\beta}^2} = 0 \Leftrightarrow X^T X \succ 0.$$

Lo que muestra que $\hat{\underline{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ es un mínimo del error de entrenamiento.

Notemos que las predicciones del modelo entrenado se pueden obtener fácilmente como

$$\hat{Y} = X\hat{\underline{\beta}} = X(X^T X)^{-1}X^T Y = HY \quad (12)$$

con $H = X(X^T X)^{-1}X^T$.

Es fácil verificar que H es un proyector, i.e., $H^n = H$.

En efecto, H proyecta Y al sub-espacio generado por las columnas de X (correspondientes a los distintos atributos).

Los errores de predicción se obtienen como

$$\hat{e} = \hat{Y} - Y = HY - Y = MY, \quad (13)$$

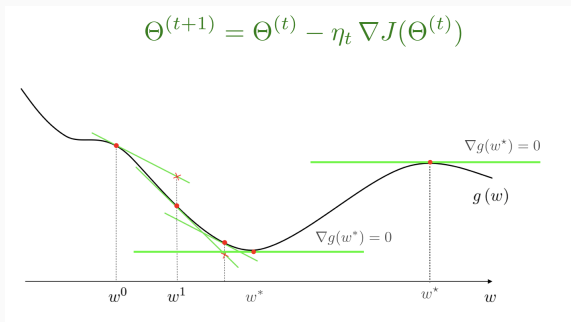
donde $M = (I - H)$ es también un proyector, ortogonal a H .

La solución matricial $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ hace evidente que el modelo lineal se puede “entrenar” en tiempo entre cúbico y cuadrático en el número de atributos.

¿Es ésta una solución eficiente computacionalmente?

Entrenamiento vía Gradiente

Una forma alternativa de entrenar el modelo lineal, consiste en usar un método de optimización ampliamente empleado en machine learning denominado *gradiente descendente*.



Dado un criterio de entrenamiento de la forma

$$\min_{\underline{\beta} \in \mathbb{R}^p} J(\underline{\beta}), \quad (14)$$

con $J(\underline{\beta})$ diferenciable, este método genera una sucesión de soluciones $\underline{\beta}^{(0)}, \underline{\beta}^{(1)}, \dots, \underline{\beta}^{(t)}$ que se obtienen iterando la siguiente regla

$$\underline{\beta}^{(t+1)} = \underline{\beta}^{(t)} - \eta_t \left. \frac{\partial J}{\partial \underline{\beta}} \right|_{\underline{\beta} = \underline{\beta}^{(t)}}, \quad (15)$$

donde $\eta_t \in \mathbb{R}$ se denomina *la tasa de aprendizaje*. Con frecuencia se usa un valor fijo $\eta_t = \eta \in (0, 1)$.

En el caso que estamos estudiando

$$J(\underline{\beta}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{X}\underline{\beta} - \mathbf{Y}\|^2 = \sum_{i=1}^n (\underline{\beta}^T \underline{x}^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (16)$$

de modo que

$$\frac{\partial J}{\partial \underline{\beta}} = \mathbf{X}^T (\mathbf{X}\underline{\beta} - \mathbf{Y}) = \sum_{i=1}^n (\underline{\beta}^T \underline{x}^{(i)} - y^{(i)}) \underline{x}^{(i)} = \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \underline{x}^{(i)} \quad (17)$$

donde $\hat{e}_i = (y^{(i)} - f(\mathbf{x}^{(i)}))$ es el error de predicción.

Combinando estos cálculos con el algoritmo genérico, obtenemos que una forma alternativa de entrenar el modelo lineal consiste en iterar la siguiente regla

$$\underline{\beta}^{(t+1)} = \underline{\beta}^{(t)} - \eta_t \sum_{i=1}^n \hat{e}_i \underline{x}^{(i)}, \quad (18)$$

que, en cada iteración, mueve el modelo hacia los ejemplos que se están prediciendo con mayor error $e^{(i)}$.

Gradiente versus Solución Clásica

- Notemos que una iteración del algoritmo anterior es lineal en el número de atributos y lineal en el número de ejemplos.
- La solución clásica es lineal en el número de ejemplos y prácticamente cúbica en el número de atributos.
- En términos de memoria (espacio), el método clásico necesita almacenar la matriz $X^T X$ y por lo tanto es cuadrático en p , mientras que el algoritmo anterior es lineal en p .
- La ventaja de entrenar via gradiente es entonces que en problemas con muchos atributos (p grande) podemos obtener rápidamente una solución aproximada al problema, que se va refinando gradualmente y que podemos detener en el caso de superar un límite de tiempo.

Una variante aún más flexible del método del gradiente, consiste en usar lo que se denomina *gradiente descendente estocástico*.

Supongamos que en cada iteración t , construimos una aproximación \tilde{G}_t del verdadero gradiente $G_t = \partial J / \partial \underline{\beta} \big|_{\underline{\beta}^{(t)}}$ tal que

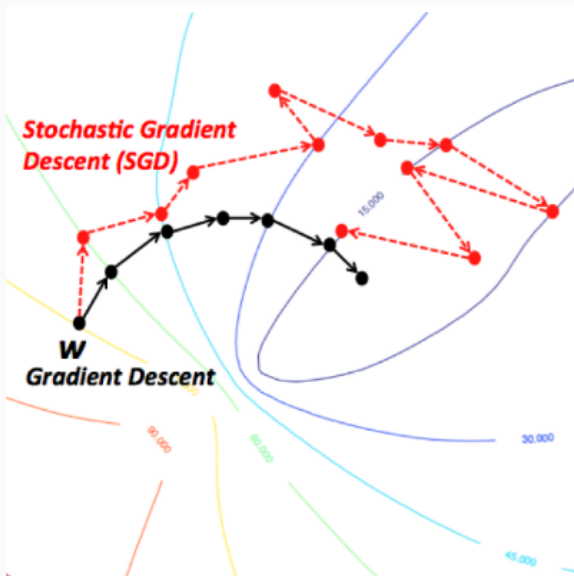
$$\mathbb{E}(\tilde{G}_t) = G_t \quad (19)$$

Bajo condiciones razonables, es posible demostrar que si iteramos la regla

$$\underline{\beta}^{(t+1)} = \underline{\beta}^{(t)} - \eta_t \tilde{G}_t, \quad (20)$$

obtenemos una sucesión convergente al óptimo de la función objetivo.

Gradiente Estocástico



En nuestro problema, debiésemos aproximar el gradiente

$$G_t = \frac{\partial J}{\partial \underline{\beta}} = \sum_{i=1}^n e^{(i)} \underline{x}^{(i)} \quad (21)$$

Una forma sencilla de hacerlo es elegir B ejemplos de entrenamiento al azar $\{(x^{(i^*)}, y^{(i^*)})\}_{i^*=1}^B$ y estimar el gradiente como

$$\tilde{G}_t = \frac{n}{B} \sum_{i^*=1}^B e^{(i^*)} x^{(i^*)} \quad (22)$$

No es difícil demostrar que:

$$\mathbb{E}(\tilde{G}_t) = G_t. \quad (23)$$

Gradiente Estocástico versus Solución Clásica

- Notemos que una iteración del algoritmo anterior es lineal en el número de atributos e independiente del número de ejemplos.
- La solución clásica es en cambio cuadrática en el número de datos y prácticamente cúbica en el número de atributos.
- La ventaja de entrenar via gradiente estocástico es entonces que en problemas con muchísimos datos y muchos atributos podemos obtener rápidamente una solución aproximada al problema, refinarla gradualmente, y eventualmente detener el entrenamiento con una solución válida si el tiempo disponible para entrenamiento se agota.

Discusión sobre la Pérdida Cuadrática

Tipos de Error en Aprendizaje

Recordemos que en todo método de aprendizaje desde ejemplos, hay 3 fuentes de error importantes:

1. **Error de Estimación:** La diferencia entre lo que aprenderíamos de un conjunto infinito de ejemplos versus lo que aprendemos desde un conjunto finito de datos.
2. **Error de Aproximación:** La diferencia entre lo que aprenderíamos en un espacio de hipótesis sin límites (todas las funciones de \mathbb{X} a \mathbb{Y}) versus lo que podemos aprender en el espacio de hipótesis seleccionado.
3. **Error de Optimización:** La diferencia entre el verdadero óptimo del criterio de entrenamiento y aquello logramos encontrar con nuestro algoritmo de entrenamiento (quizás aproximado o truncado).

Para analizar el comportamiento de una determinada función de pérdida, es útil ignorar estos errores y pensar qué obtendríamos con dicha función si pudiésemos buscar en un espacio de hipótesis ilimitado, con conocimiento perfecto de $p(x, y)$ (infinitos ejemplos) y con un solver óptimo.

En nuestro caso, nos interesa saber qué obtendríamos usando la pérdida cuadrática si pudiésemos minimizar

$$\mathbb{E}(L(f(x), y)) = \sum_{x,y} (f(x) - y)^2 p(x, y). \quad (24)$$

Sea $r(x) = \mathbb{E}(y|x) = \sum_y y p(y|x)$.

Notemos que

$$\begin{aligned}\sum_{x,y} (f(x) - y)^2 p(x, y) &= \sum_{x,y} (f(x) - r(x) + r(x) - y)^2 p(x, y) & (25) \\ &= \sum_{x,y} (f(x) - r(x))^2 p(x, y) + \sum_{x,y} (r(x) - y)^2 p(x, y) \\ &\quad - 2 \sum_{x,y} (f(x) - r(x))(r(x) - y) p(x, y).\end{aligned}$$

Descomposición del Error Cuadrático

Por otro lado,

$$\begin{aligned}\sum_{x,y} (f(x) - r(x))(r(x) - y)p(x,y) &= \sum_{x,y} (f(x) - r(x))(r(x) - y)p(y|x)p(x) \\&= \sum_x (f(x) - r(x))p(x) \left(\sum_y (r(x) - y)p(y|x) \right) \\&= \sum_x (f(x) - r(x))p(x) \left(r(x) - \sum_y y p(y|x) \right) \\&= \sum_x (f(x) - r(x))p(x) (r(x) - r(x)) = 0.\end{aligned}$$

Descomposición del Error Cuadrático

Entrenar $f(x)$ con la pérdida cuadrática es entonces equivalente a minimizar

$$\sum_{x,y} (f(x) - r(x))^2 p(x,y) + \sum_{x,y} (r(x) - y)^2 p(x,y). \quad (26)$$

Sin embargo, $r(x)$ no depende de $f(x)$, por lo entrenar $f(x)$ con la pérdida cuadrática es equivalente a minimizar

$$R(f) = \sum_{x,y} (f(x) - r(x))^2 p(x,y) = \sum_x \sum_y (f(x) - r(x))^2 p(y|x) p(x) \quad (27)$$

$$= \sum_x (f(x) - r(x))^2 p(x). \quad (28)$$

Es claro que $f(x) = r(x) = \mathbb{E}(y|x)$ es un mínimo de $R(f)$.

Error de Bayes en Regresión

En general, el riesgo mínimo que podemos alcanzar al entrenar el modelo lineal no es cero, aún ignorando las 3 fuentes de error clásicas en ML.

¿Porqué o cuándo usar la función de pérdida cuadrática?

Entrenar con la pérdida cuadrática tiene sentido cuando nos interesa aproximar el valor esperado de la respuesta (y) frente a un determinado input x .

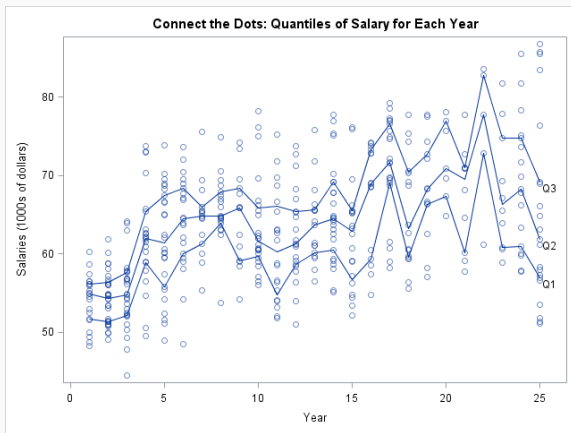
Ejemplo

Supongamos que deseamos aprender la demanda por bicicletas en Ñuñoa a partir de una serie de atributos que incluyen tipo de día (feriado o laboral), hora del día y posición geográfica.

- Es claro que para una misma configuración de atributos (tipo de día, hora del día y posición geográfica) la demanda puede variar.
- Lo que sucede es que y es una variable aleatoria que se mantiene aleatoria aún si conocemos x , es decir, existe una determinada distribución de probabilidad $p(y|x)$.
- Aproximar $\mathbb{E}(y|x)$ consiste en aproximar la demanda **media** de bicicletas para un tipo de día, hora del día y posición geográfica. En otras palabras, el valor esperado de $p(y|x)$.

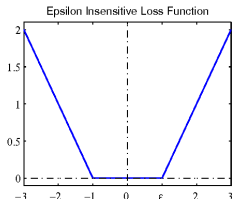
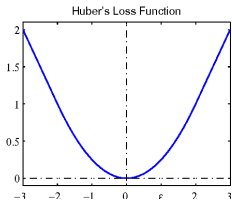
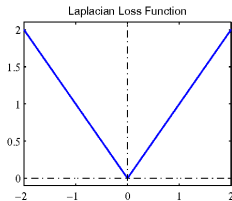
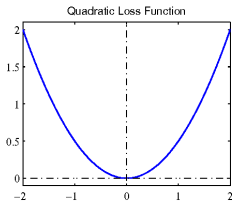
Quantile Regression

Tarea: ¿Cómo modificar la función de costo si nos interesa aproximar un cuantil de $y|x$ en vez de la media?



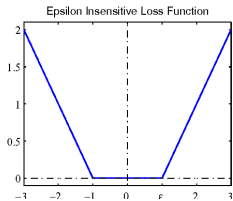
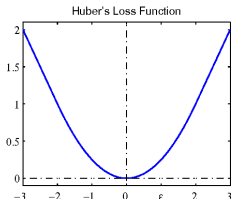
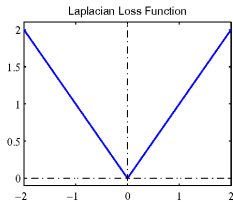
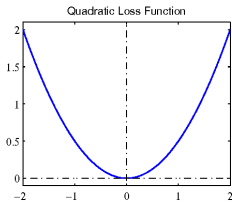
Otras Funciones de Pérdida

Si queremos aprender otras estadísticas de la distribución de $y|x$ podría ser necesario emplear otras losses.



Otras Funciones de Pérdida

Aún si decidimos modelar la media de $y|x$, podría no ser conveniente emplear la función de pérdida cuadrática.



El punto de vista clásico (como se presenta el modelo lineal en textos de estadística) consiste en adoptar el supuesto de que la v.a. y se puede descomponer aditivamente de la forma

$$y = f^*(x) + \epsilon \quad (29)$$

donde $f^*(x)$ es una función determinista de x , desconocida, que se busca aproximar, y ϵ es una v.a. independiente de x con $\mathbb{E}(\epsilon) = 0$.

Estos supuestos llevan a concluir que

$$f^*(x) = \mathbb{E}(y|x), \quad (30)$$

es decir, aquello que se busca aproximar es justamente el valor esperado de y dado x .

La justificación clásica sobre el uso de la función cuadrática en el modelo lineal requiere suponer que $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$. Notemos que en este caso, se obtiene inmediatamente que

$$y|x \sim \mathcal{N}(f^*(x), \sigma^2), \quad (31)$$

es decir, modelo lineal $f(x; \underline{\beta})$ está aproximando el valor esperado de la distribución de y condicional a x .

Este punto de vista es interesante porque permite demostrar que entrenar el modelo lineal utilizando la función cuadrática es equivalente a maximizar la función de verosimilitud condicional $\mathcal{L}(\underline{\beta}) = P(\underline{Y}|\underline{\beta}, \underline{X})$, donde $\underline{X} = \{x^{(i)}\}_{i=1}^n$ e $\underline{Y} = \{y^{(i)}\}_{i=1}^n$.

En efecto, asumiendo que los ejemplos son independientes

$$\mathcal{L}(\underline{\beta}) = \prod_{i=1}^n p(y^{(i)}|x^{(i)}, \underline{\beta}). \quad (32)$$

Como $y^{(i)}|x^{(i)} \sim \mathcal{N}(f(x^{(i)}; \underline{\beta}), \sigma^2)$, obtenemos que

$$\mathcal{L}(\underline{\beta}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp \left\{ \frac{-(y^{(i)} - f(x^{(i)}; \underline{\beta}))^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (33)$$

Se sigue fácilmente, que la función de log-verosimilitud toma la forma

$$\begin{aligned}\ell(\underline{\beta}) &= \sum_{i=1}^n \log p(y^{(i)} | x^{(i)}, \underline{\beta}) \\ &= \sum_{i=1}^n \frac{-(y^{(i)} - f(x^{(i)}; \underline{\beta}))^2}{2\sigma^2} - \log \sqrt{2\pi\sigma^2}.\end{aligned}\tag{34}$$

Como σ^2 es independiente de $\underline{\beta}$, obtenemos que maximizar la verosimilitud es equivalente a minimizar

$$J(\underline{\beta}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (y^{(i)} - f(x^{(i)}; \underline{\beta}))^2.\tag{35}$$

¿Porqué o cuándo usar la función de pérdida cuadrática?

Si asumimos un modelo aditivo $y = f^*(x) + \epsilon$ con ruido gaussiano $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$, entrenar el modelo lineal con la **función de pérdida cuadrática**, es equivalente a maximizar la función de verosimilitud (condicional) $\mathcal{L}(\underline{\beta}) = P(\underline{Y}|\underline{\beta}, \underline{X})$.

Importante

Si el ruido ϵ sigue otra distribución de probabilidad y se desea entrenar el modelo para maximizar la función de verosimilitud, la función de pérdida a utilizar podría no ser la pérdida cuadrática.

Ejemplo

Si ϵ sigue una distribución de Laplace

$$p(\epsilon) = \frac{1}{2\sigma} \exp \left\{ \frac{-|\epsilon|}{\sigma} \right\}, \quad (36)$$

y se desea entrenar el modelo para maximizar la función de verosimilitud, la función de pérdida a utilizar debe ser

$$L(f(x), y) = |f(x) - y|. \quad (37)$$

Inferencias Clásicas sobre el Modelo Lineal

Efectos de cada Atributo/Predictor

Una vez que el modelo lineal ha sido entrenado, es común interpretar el valor de cada coeficiente $\hat{\beta}_i$ como la “importancia” o el “efecto” del atributo x_i en la respuesta y . Si $\hat{\beta}_i \neq 0$ se podría concluir que el atributo/predictor x_i tiene un efecto sobre la respuesta.

Análogamente, si $|\hat{\beta}_i| > |\hat{\beta}_j|$ se podría concluir que el atributo/predictor x_i es “más importante” que x_j para predecir la respuesta.

Es necesario ser muy muy cautos con esta interpretación.

Efectos de cada Atributo/Predictor

Una razón es que los atributos podrían estar en escalas muy diferentes y los coeficientes obtenidos no son insensibles a la escala de medida: si hacemos una regresión, usando un atributo que ha sido medido en centímetros y luego lo medidos en metros, el coeficiente cambia.

Este problema suele resolverse **escalando apropiadamente los datos antes de hacer la regresión**.

Una razón más sutil es que algunos atributos podrían ser **mucho más variables que otros**, lo que hace más probable observar valores $\hat{\beta}_i \neq 0$ “por azar”, es decir, efectos que no son tales.

Para poder concluir de modo más robusto sobre los efectos de los diferentes predictores necesitamos implementar un contraste de hipótesis.

Para esto necesitamos inferir la distribución de $\underline{\hat{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ o de algún estadístico que dependa de él.

En este análisis resultará cómodo asumir que $y = f^*(x) + \epsilon^*$ con $\epsilon^* \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ y que $f^*(x) = \underline{\beta}^{*T} x$ para algún $\underline{\beta}^*$. Consideraremos además que los predictores X están fijos, es decir sólo Y es aleatorio.

Notemos primero que si los supuestos anteriores son correctos, entonces $Y = X\underline{\beta}^* + \epsilon^*$, con $\epsilon^* \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$. Por lo tanto,

$$\underline{\hat{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T Y = (X^T X)^{-1} X^T (X \underline{\beta}^* + \epsilon^*) = \underline{\beta}^* + (X^T X)^{-1} X^T \epsilon^*$$

Y entonces,

$$\mathbb{E}[\underline{\hat{\beta}}] = \underline{\beta}^* + (X^T X)^{-1} X^T \mathbb{E}[\epsilon^*] = \underline{\beta}^*$$

es decir, $\underline{\hat{\beta}}$ es un estimador insesgado de $\underline{\beta}^*$.

Por otro lado,

$$\begin{aligned}\hat{\underline{\beta}} - \mathbb{E}[\hat{\underline{\beta}}] &= (X^T X)^{-1} X^T Y - \underline{\beta}^* \\ &= (X^T X)^{-1} X^T Y - (X^T X)^{-1} X^T X \underline{\beta}^* \\ &= (X^T X)^{-1} X^T (Y - X \underline{\beta}^*) \\ &= (X^T X)^{-1} X^T \epsilon^*\end{aligned}\tag{38}$$

De modo que,

$$\begin{aligned}\text{Cov}(\hat{\underline{\beta}}) &= \mathbb{E} \left[\left(\hat{\underline{\beta}} - \mathbb{E} [\hat{\underline{\beta}}] \right) \left(\hat{\underline{\beta}} - \mathbb{E} [\hat{\underline{\beta}}] \right)^T \right] \\ &= \mathbb{E} \left[(X^T X)^{-1} X^T \epsilon^* \epsilon^{*T} X (X^T X)^{-1} \right] \\ &= (X^T X)^{-1} X^T \mathbb{E} [\epsilon^* \epsilon^{*T}] X (X^T X)^{-1} \\ &= \sigma^2 (X^T X)^{-1} X^T X (X^T X)^{-1} \\ &= \sigma^2 (X^T X)^{-1}\end{aligned}\tag{39}$$

donde $\mathbb{E} [\epsilon^* \epsilon^{*T}] = I$ del hecho que $\epsilon^* \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$.

Distribución de $\hat{\underline{\beta}}$

Notemos también que si $Y = X\underline{\beta}^* + \epsilon^*$, con $\epsilon^* \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 I)$ y X está fijo, entonces $Y \sim \mathcal{N}(X\underline{\beta}^*, \sigma^2 I)$. De aquí se sigue que la distribución de $\hat{\underline{\beta}} = (X^T X)^{-1} X^T Y$ debe ser normal. Por lo tanto,

$$\hat{\underline{\beta}} \sim \mathcal{N}(\underline{\beta}^*, \sigma^2 (X^T X)^{-1}) \quad (40)$$

Usando una propiedad conocida de la distribución normal multi-variada, concluimos de inmediato que

$$\hat{\underline{\beta}}_j \sim \mathcal{N}(\underline{\beta}_j^*, \sigma^2 (X^T X)^{-1}_{jj}) \quad (41)$$

o bien que

$$\frac{(\hat{\underline{\beta}}_j - \underline{\beta}_j^*)}{\sigma^2 (X^T X)^{-1}_{jj}} \sim \mathcal{N}(0, 1) \quad (42)$$

lo que nos permite hacer inferencias (contrastes o intervalos de confianza) sobre $\underline{\beta}_j^*$ cuando σ^2 es conocida.

Una forma de estimar σ^2 se obtiene definiendo $\hat{\mathbf{e}} = (Y - \hat{Y})$ y notando que

$$\hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}} = Y^T M^T M Y = Y^T M Y \quad (43)$$

con $M = I - H$.

Como $X^T M = M X = 0$, es fácil ver que

$$Y^T M Y = \epsilon^{*T} M \epsilon^* \quad (44)$$

Como $\epsilon/\sigma \sim \mathcal{N}(0, I)$, esto implica inmediatamente que (Teorema de formas cuadráticas gaussianas)

$$\frac{\hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}}}{\sigma^2} \sim \chi_\nu^2 \text{ with } \nu = \text{tr}(M) = \text{tr}(I - H) \quad (45)$$

Como

$$\begin{aligned}\text{tr}(M) &= \text{tr}(I - H) = \text{tr}(I_n) - \text{tr}(H) = n - \text{tr}(H) \\ \text{tr}(H) &= \text{tr}\left(X(X^T X)^{-1}X^T\right) = \text{tr}\left((X^T X)^{-1}X^T X\right) = \text{tr}(I_p) = d + 1 ,\end{aligned}\tag{46}$$

obtenemos que

$$\frac{\hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}}}{\sigma^2} \sim \chi_{n-d-1}^2\tag{47}$$

De aquí se sigue que

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\hat{\mathbf{e}}^T \hat{\mathbf{e}}}{n - d - 1} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n - d - 1}$$

es un estimador insesgado de σ^2 .

Combinando

$$\frac{(\hat{\underline{\beta}}_j - \underline{\beta}_j^*)}{\sigma^2 (X^T X)_{jj}^{-1}} \sim \mathcal{N}(0, 1) \quad (48)$$

con

$$\frac{(n - d - 1)\hat{\sigma}^2}{\sigma^2} \sim \chi_{n-d-1}^2 \quad (49)$$

obtenemos que

$$\frac{(\hat{\underline{\beta}}_j - \underline{\beta}_j^*)}{\hat{\sigma}^2 (X^T X)_{jj}^{-1}} \sim \mathcal{T}_{n-d-1} \quad (50)$$

lo que nos permite hacer inferencias (contrastes o intervalos de confianza) sobre $\underline{\beta}_j^*$ cuando σ^2 es desconocida.

El término

$$z_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\hat{\sigma}^2 (X^T X)^{-1}_{jj}} \quad (51)$$

se denomina **z-score** del atributo/predictor x_j y se puede interpretar como el “peso corregido” de x_j . Cuando $|z_j| > 2$, suele concluirse que x_j efectivamente tiene un efecto sobre y . ¿Porqué?

1. Regresión en el Modelo Supervisado
2. Entrenamiento del Modelo Lineal
3. ¿Porqué o Cuándo usar la Función de Pérdida Cuadrática?
4. Inferencias Clásicas sobre el Modelo Lineal