Práctica 8. Modelos no paramétricos: Procesos Gaussianos

Objetivo

El objetivo de esta práctica es utilizar **Procesos Gaussianos** (GPs), un método no paramétrico de aproximación de funciones basado en kernels. Utilizaremos GPs para resolver un problema de regresión no lineal y explorar el papel que juega el kernel y sus hiperparámetros en el ajuste de la función.

Estudio previo

- Repasa las transparencias de clase y estudia las funciones auxiliares proporcionadas para esta práctica.
- o Familiarízate con la documentación de la clase GaussianProcessRegressor de scikit-learn, los distintos tipos de *kernels* que se pueden utilizar y su interpretación (estos enlaces: [1] y [2], pueden ayudarte a esto último).

Desarrollo de la práctica

- 1. **Regresión simple**. Utilizaremos el notebook P8_1D.ipynb . El notebook te guiará en los distintos pasos:
 - a) Emplea la clase GaussianProcessRegressor para ajustar el dataset weightdata_clean.mat . Utiliza primero un kernel RBF y ajusta sus parámetros manualmente. Explica cómo cambian los resultados.
 - b) Ahora, explora el comportamiento de otros *kernels*. Puedes ver los distintos tipos de *kernels* soportados por <code>scikit-learn</code>. Justifica tu elección y los resultados que obtienes con los parámetros elegidos manualmente. Para impedir la optimización de los hiperparámetros, usa <code>optimizer=None</code> al instanciar <code>GaussianProcessRegressor</code>.
 - c) Ahora, optimiza el kernel elegido, realizando para ello la instanciación de GaussianProcessRegressor sin especificar optimizer=None. Compara los resultados con tu ajuste manual.
- 2. Regresión 2D. Utilizaremos el notebook P8_2D.ipynb:
 - a) Revisa el notebook proporcionado. En este apartado, trabajaremos con los datos, accesibles públicamente en el portal del Ayuntamiento, de calidad del aire en Zaragoza. Concretamente, usaremos el dataset que os aportamos calidad_aire_2023.csv.
 - Tu objetivo es utilizar procesos Gaussianos para predecir (interpolar) la calidad del aire en el área de la ciudad comprendida por las ocho estaciones de medición que se encuentran en Zaragoza.
 - b) Propón kernels para realizar las estimaciones con los contaminantes que elijas analizar. Justifica tus elecciones.
 - c) ¿Donde colocarías tu la siguiente estación? ¿Por qué?

3. **Opcional**: Utilizaremos el notebook P8_extra.ipynb:

- a) Dispones de varios datasets con los datos de calidad de aire de la estación "Centro", ubicada en Plaza Aragón. Cada fichero tiene los datos de un indicador: O3ZgzCentro.csv, N2ZgzCentro.csv, C0ZgzCentro.csv y noxZgzCentro.csv.
- b) Utiliza lo que has aprendido en el apartado anterior para hacer una predicción de los datos a partir del histórico o, si existen, para rellenar huecos en él. Para ello, observa los datos, diseña un kernel adecuado, optimiza los hiperparámetros y analiza los resultados.
- c) ¿Qué kernels has diseñado? Justifica tu respuesta y evalúa los resultados obtenidos.



La nota máxima sin el apartado opcional es 8.

A entregar en Moodle

Los notebooks P8_1D.ipynb, P8_2D.ipynb y P8_extra.ipynb con el código de cada apartado, los resultados, su interpretación y las conclusiones que hayas obtenido.