

# Proyecto final

2025-11-07

## Introducción

En el artículo de Ryan Tibsharini (2023) sobre inferencia conformal, el autor presenta un marco general para cuantificar la incertidumbre en problemas de predicción sin importar supuestos paramétricos sobre la distribución  $P$  de los datos. La idea central consiste en transformar cualquier predictor puntual en un predictor para conjuntos que garantice cobertura válida en muestras finitas.

En el contexto de regresión, esta metodología permite contruir bandas de predicción que conserva la propiedad de cobertura deseada, independientemente del algoritmo usado para estimar la función de regresión

## Objetivos

Sea  $(X_i, Y_i) \sim P, i = 1, \dots, n$  iid, las variables explicativas y dependiente de una distribución  $P$  en  $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ . Podríamos pensar la dimension del conjunto de las variables explicativas en  $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$ , mientras que la variable dependiente en el espacio de todos los reales  $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ . Dado una probabilidad  $\alpha$  llamado tasa de no cobertura, queremos encontrar una banda de predicción

$$\hat{C}_n : \mathcal{X} \rightarrow \{\text{subconjunto de } \mathcal{Y}\}$$

Con la propiedad que para un nuevo par de datos  $(X_{n+1}, Y_{n+1}) \sim P$

$$P(Y_{n+1} \in \hat{C}_n(x_{n+1})) \geq 1 - \alpha \quad (1)$$

Donde la probabilidad es sobre los datos  $(X_i, Y_i) \quad i = 1, \dots, n+1$ . Por otra parte, si no asumimos ninguna teoría asintótica ni tampoco ninguna distribución en  $P$ , obtener una cobertura exacta es algo muy difícil en general. Podríamos hacer algo totalmente trivial para obtenerla:

$$\hat{C}_n(X_{n+1}) = \begin{cases} \mathcal{Y} & \text{con probabilidad } 1 - \alpha, \\ \emptyset & \text{con probabilidad } \alpha. \end{cases}$$

Siempre tendrá cobertura exacta  $1 - \alpha$ , lo cual es, lo que queremos lograr con la ecuación (1).

La pregunta real sería, podríamos lograr la ecuación (1) en muestras finitas sin asumir ninguna distribución  $P$ , haciendo algo “no trivial”? En particular, queremos que nuestra estrategia se adapte a la dificultad del problema, en el siguiente sentido: cuanto más fácil sea predecir  $Y_{n+1}$  a partir de las variables explicativas  $X_{n+1}$ , mas chico nos gustaría que fuera el conjunto  $\hat{C}_n(X_{n+1})$

Supongamos que nuestro objetivo inicial es encontrar una cola de intervalo de predicción.  $\hat{C}_n = (-\infty, \hat{q}_n]$

Dada esta ecuación, un punto de partida natural sería fijar  $\hat{q}_n$ , como el cuantil muestral de nivel  $1 - \alpha$  de  $Y_1, \dots, Y_n$  el cual denotamos por

$$P(Y_{n+1} \leq \hat{q}_n) \sim 1 - \alpha$$

$$\hat{q}_n = \begin{cases} Y[(1 - \alpha)(n + 1)] & \text{si } [(1 - \alpha)(n + 1) \leq n, \\ \infty & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

Aquí  $Y_{(1)}, Y_{(2)}, \dots, Y_{(n)}$  son los estadísticos de orden de la muestra  $Y_{(1)} \leq Y_{(2)} \leq \dots, Y_{(n)}$ . Se verifica la cobertura en muestra finita de la ecuación (1) debido a la independencia de las variables. Por otra parte el rango de  $Y_{n+1}$  se distribuye uniforme en el conjunto  $\{1, \dots, n+1\}$ , es decir, la predicción  $Y_{n+1}$  tiene probabilidad  $\frac{1}{n+1}$  de caer en cualquier posición del conjunto ordenado.

## Método de Naive

Veamos la primera idea clave sobre regresión, donde observamos ambos  $X_i$  and  $Y_i \in R \ i = 1, \dots, n$ , y queremos un conjunto de predicción para  $Y_{n+1}$  basado en  $X_{n+1}$ . Supongamos que  $\hat{f}_n$  es cualquier predictor puntual, entrenado en  $(X_i, Y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ . En otras palabras,  $\hat{f}_n(x)$  predice el valor de  $y$  que esperamos observar en  $x$ .

Definimos los residuos de los datos de entrenamiento,

$$R_i = |Y_i - \hat{f}_n(X_i)|, \ i = 1, \dots, n$$

tenemos  $\hat{q}_n = [(1 - \alpha)(n + 1)]$  el mas chico de  $R_1, \dots, R_n$ , podemos definir el conjunto de predicción como  $\hat{C}_n(x) = \{y : |y - \hat{f}_n(x)| \leq \hat{q}_n\}$

O en otras palabras:

$$\hat{C}_n(x) = [\hat{f}_n(x) - \hat{q}_n, \hat{f}_n(x) + \hat{q}_n]$$

Este método es aproximadamente válido para muestras grandes, bajo la condición de que  $\hat{f}_n(x)$  sea lo suficientemente preciso, es decir, que  $\hat{q}_n$  este cerca del cuantil  $1 - \alpha$  de  $R_i$ . Un problema de este método es que los intervalos de predicción pueden presentar una considerable subcobertura, dado que se están empleando los residuos dentro de la muestra. Para evitar esto, se plantea la metodología de los intervalos de predicción conformales

Ejemplo práctico: Supongamos que tenemos un conjunto de datos  $X = (1, 2, 3, 4)$  y  $Y = (2, 4, 6, 8)$ , donde ajustamos un modelo lineal simple  $\hat{f}(x) = 1 + x$ , y obtenemos  $\hat{f}(x) = (2, 3, 4, 5)$  y los residuos  $e_i = (0, 1, 2, 3)$ . Luego calculamos el cuantil con cobertura  $1 - \alpha$ , para ello calculamos  $\hat{q}_n = [(0.8)(5)] = 4$ . Ordenamos los residuos de menor a mayor y vemos que el residuo  $e_4 = 3$ . Luego nos construimos un intervalo de predicción para  $X_{n+1} = 5$   $\hat{f}(5) = 6$ . Por lo que el intervalo conformal con cobertura 0.8 es :  $\hat{C}(5) = [6 - 3, 6 + 3] = [3, 9]$

## Separación de la muestra de intervalos de predicción

En esta primera parte de esta sección, nos enfocaremos en la parte de regresión, es decir, que  $Y$  pertenece a todos los reales/

En concreto, dividimos el conjunto de entrenamiento en 2:

- $T_1$ , es el conjunto de entrenamiento propiamente dicho
- $T_2$  es el conjunto de calibración o testeo.

Tiene sentido pensar que la intersección de ambos es vacía,  $T_1 \cap T_2 = \emptyset$  y  $T_1 \cup T_2 = \{1, 2, \dots, n\}$ , sea  $n_1 = |T_1|$  y  $n_2 = |T_2|$

En el siguiente paso, entrenamos el predictor puntual usando los datos del conjunto de entrenamiento propiamente dicho  $(X_i, Y_i)$  donde  $i \in T_1$  y lo denotamos como  $\hat{f}_{n_1}$ . Luego, vemos los residuos en el conjunto de calibración:  $e_i = |Y_i - \hat{f}_{n_1}| \ i \in T_2$

Por lo que llegamos a que el residuo mas chico del cuantil conformal es el siguiente:  $\hat{q}_{n_2} = [(1 - \alpha)(n_2 + 1)]$   $R_i \ i \in R_2$ . Aquí se calcula un cuantil de nivel de cobertura  $1 - \alpha$  de los residuos  $R_i$ , para construir un **intervalo de predicción** que tenga cobertura aproximada  $1 - \alpha$ , es decir, primero se ordenan los residuos  $R_i$  del conjunto  $T_2$  de menor a mayor. Luego, se busca el cuantil empírico de orden  $(1 - \alpha)$ , es decir, el residuo en la posición

$[(1-\alpha)(n_2+1)]$  donde  $n_2$  es el tamaño del conjunto de calibración. Este valor se denota como:  $\hat{q}_{n_2}$  y se utiliza para crear un intervalo de predicción al rededor de la estimación puntual,  $C(x) = [\hat{f}_{n_1}(x) - \hat{q}_{n_2}, \hat{f}_{n_1}(x) + \hat{q}_{n_2}]$

La mayor garantía que podemos obtener es que:

$$P(y_{n+1} \in \hat{C}_n(X_{n+1}) | (X_i, Y_i)_{i \in T_1}) \in [1 - \alpha, 1 - \alpha + \frac{1}{n_2 + 1}]$$

Finalmente:

$$Y_{n+1} \leq \hat{C}_n(X_{n+1}) \Leftrightarrow e_{n+1} \leq \hat{q}_{n_2} \Leftrightarrow e_{n+1} \leq [(1-\alpha)(n_2+1)]$$

Esto ocurre con probabilidad al menos  $1 - \alpha$  y a al menos  $1 - \alpha + \frac{1}{n+1}$

## Full conformal prediciton

Ahora hacemos algo distinto a lo que hacíamos hasta ahora, entrenamos nuestro algoritmo de predicción con los datos  $(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n), (x, y)$ . Es decir, usamos un conjunto de entrenamiento extendido, con  $n + 1$  puntos (incluyendo el nuevo par  $(x, y)$ ).

A partir de este conjunto, obtenemos un predictor puntual  $\hat{f}_n(x, y)$

Luego, definimos los residuos como:

- para  $i = 1, \dots, n$

$$R_i^{(x,y)} = |Y_i - \hat{f}_n(x, y)(X_i)|$$

- Para el nuevo punto de prueba:

$$R_{n+1}^{(x,y)} = |y - \hat{f}_n(x, y)(x)|$$

Finalmente, definimos el conjunto conformal como:

$$\hat{C}_n(x) = \{y \in R_{n+1}^{(x,y)} \leq [(1-\alpha)(n+1)] - \text{ésimo menor de los } R_1^{((x,y))}, \dots, R_n^{x,y}\}$$

Es decir, para cada valor candidato  $y$ , se crea un conjunto de entrenamiento aumentado:

$$\{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n), (X_{n+1}, y)\}$$

Luego se evalúa si el residuo del nuevo punto de la prueba  $R_{n+1}^{(x,y)}$  está entre los más pequeños de todos los residuos generados con ese conjunto extendido. Si cumple la condición, entonces ese  $y$  pertenece al intervalo de predicción.

## Intervalos predictivos vía Jackknife

Aquí la idea es separar el conjunto en entrenamiento y testeo, dejando una observación aparte para testear, es decir, entrenas  $\hat{f}_{-i}$  dejando fuera la observación  $i$ , luego se calculan los residuos