

# **Inferencia Conformal**

Mauro Loprete y Maximiliano Saldaña

1/1/22

# Tabla de contenidos

<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Inferencia conformal</b>	<b>4</b>
2.1	Un resultado previo . . . . .	4
2.2	Método <i>naive</i> de construcción de intervalos . . . . .	4
2.3	Intervalos de predicción conformales . . . . .	5
2.3.1	Teorema . . . . .	6
2.4	Intervalos de predicción conformales con muestras separadas . . . . .	7
2.4.1	Teorema . . . . .	7
2.4.2	Teorema . . . . .	8
2.5	Intervalos conformales con múltiples separaciones de la muestra . . . . .	8
2.6	Intervalos predictivos mediante Jackknife . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Aplicación</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Conclusión</b>	<b>11</b>
<b>5</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Anexo</b>	<b>13</b>

# 1 Introducción

En Lei et al. (2016) los autores plantean un marco general para realizar inferencia predictiva sin supuestos distribucionales en un contexto de regresión, empleando la *inferencia conformal*. Mediante la metodología planteada se pueden obtener intervalos de confianza con validez en muestra finitas (no asintótica) para una variable de respuesta, empleando cualquier estimador de la función de regresión.

El problema se plantea de la siguiente manera: Se considera  $Z_1, \dots, Z_n \sim F$  i.i.d., donde  $Z_i = (X_i, Y_i)$  es una variable aleatoria en  $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ ,  $Y_i$  es la variable de respuesta y  $X_i = X_i(1) \dots, X_i(d)$  son las covariables. Se tiene la función de regresión:

$$\mu(x) = E(Y|X = x), \quad x \in \mathbb{R}^d$$

Es de interés predecir la nueva respuesta  $Y_{n+1}$  a las covariables  $X_{n+1}$ , sin hacer supuestos sobre  $\mu$  o  $F$ . Dado un nivel de cobertura  $\alpha$ , el objetivo es construir un intervalo de predicción  $C \subseteq \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$  basado en  $Z_1, \dots, Z_n$  que cumpla:

$$P(Y_{n+1} \in C(X_{n+1})) \geq 1 - \alpha$$

En esta expresión se supone que  $Z_{n+1} = (X_{n+1}, Y_{n+1})$  proviene también de la distribución  $F$  y  $C(x) = \{y \in \mathbb{R} : (x, y) \in C\}$ ,  $x \in \mathbb{R}^d$

## 2 Inferencia conformal

La idea básica de la inferencia conformal, dadas las definiciones de la introducción, consiste en que para decidir si un valor  $y$  está incluido en el intervalo  $C(X_{n+1})$  consideramos poner a prueba la hipótesis nula de que  $Y_{n+1} = y$  y se construye un valor-p válido basado en los cuantiles empíricos de la muestra aumentada  $Z_1, \dots, Z_n, Z_{n+1}$ .

### 2.1 Un resultado previo

Sean  $U_1, \dots, U_n$  una muestra i.i.d de una variable aleatoria continua. Para un nivel de no cobertura  $\alpha \in (0, 1)$  y una observación  $U_{n+1}$ , nótese que:

$$P(U_{n+1} \leq \hat{q}_{1-\alpha}) \geq 1 - \alpha \quad (2.1)$$

Donde  $\hat{q}_{1-\alpha}$  es el cuantil de la muestra  $U_1, \dots, U_n$  definido por:

$$\hat{q}_{1-\alpha} = \begin{cases} U_{(\lceil (n+1)(1-\alpha) \rceil)} & \text{si } \lceil (n+1)(1-\alpha) \rceil \leq n \\ \infty & \text{en caso contrario} \end{cases} \quad (2.2)$$

Aquí  $U_{(1)} \leq \dots \leq U_{(n)}$  son los estadísticos de orden de la muestra. Se verifica la cobertura en muestra finita de la Ecuación 2.1: dada la independencia de las variables, el rango de  $U_{n+1}$  en la muestra se distribuye uniforme en el conjunto  $\{1, \dots, n+1\}$ , entonces

### 2.2 Método *naive* de construcción de intervalos

Usando el resultado previo de la sección anterior y en el contexto de regresión planteado en la Sección Capítulo 1, un método sencillo para contruir un intervalo predictivo para  $Y_{n+1}$  ante el valor  $X_{n+1}$  es:

$$C_{naive}(X_{n+1}) = [\hat{\mu}(X_{n+1}) - \hat{F}_n^{-1}(1 - \alpha), \hat{\mu}(X_{n+1}) + \hat{F}_n^{-1}(1 - \alpha)] \quad (2.3)$$

donde  $\hat{\mu}$  es un estimador de la función de regresión,  $\hat{F}_n$  la distribución empírica de los residuos dentro de la muestra  $|Y_i - \hat{\mu}(X_i)|$ ,  $i = 1, \dots, n$  y  $\hat{F}_n^{-1}(1 - \alpha)$  el cuantil  $1 - \alpha$  de  $\hat{F}_n$ .

Este método es aproximadamente válido para muestras grandes, bajo la condición de que  $\hat{\mu}$  sea lo suficientemente preciso, es decir, que  $F_n^{-1}(1 - \alpha)$  esté cerca del cuantil  $1 - \alpha$  de  $|Y_i - \mu(X_i)|$ . Para que esto se cumpla en general es necesario el cumplimiento de condiciones de regularidad tanto para la distribución  $F$  de los datos y para  $\hat{\mu}$ , como que el modelo esté correctamente especificado.

Un problema de este método es que los intervalos pueden presentar una considerable subcobertura, dado que se están empleando los residuos dentro de la muestra. Para subsanar esto, en Lei et al. (2016) se plantea la metodología de los intervalos de predicción conformales.

## 2.3 Intervalos de predicción conformales

Para cada valor  $y \in \mathbb{R}$  se construye un estimador de regresión aumentado  $\hat{\mu}_y$ , el cual se estima en el conjunto de datos aumentado  $Z_1, \dots, Z_n, (X_{n+1}, y)$ . Luego, se define:

$$R_{y,i} = |Y_i - \hat{\mu}_y(X_i)|, \quad i = 1, \dots, n \quad (2.4)$$

$$R_{y,n+1} = |y - \hat{\mu}_y(X_{n+1})| \quad (2.5)$$

Con el rango de  $R_{y,n+1}$  entre los demás residuos de la muestra  $R_{y,1}, \dots, R_{y,n}$  se calcula:

$$\pi(y) = \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^{n+1} \mathbb{I}\{R_{y,i} \leq R_{y,n+1}\} = \frac{1}{n+1} + \frac{1}{n+1} \sum_{i=1}^n \mathbb{I}\{R_{y,i} \leq R_{y,n+1}\} \quad (2.6)$$

que es la proporción de los puntos de la muestra aumentada cuyos residuos dentro de la muestra son más pequeños que el residuo  $R_{y,n+1}$ . Como los datos son i.i.d. y suponiendo la simetría de  $\hat{\mu}$ , se puede apreciar que el estadístico  $\pi(Y_{n+1})$  se distribuye uniforme en  $1/(n+1), 2/(n+1), \dots, 1$ , lo cual implica<sup>1</sup>:

$$P((n+1)\pi(Y_{n+1}) \leq \lceil (1-\alpha)(n+1) \rceil) \geq 1-\alpha \quad (2.7)$$

Esta expresión se puede interpretar como que  $1 - \pi(Y_{n+1})$  da un valor-p válido conservador para la prueba de hipótesis donde  $H_0)Y_{n+1} = y$ .

Aplicando dicha prueba sobre todos los posibles valores de  $y \in \mathbb{R}$ , la ecuación Ecuación 2.7 lleva al intervalo de predicción conformal evaluado en  $X_{n+1}$ :

$$C_{conf}(X_{n+1}) = [y \in \mathbb{R} : (n+1)\pi(Y_{n+1}) \leq \lceil (1-\alpha)(n+1) \rceil] \quad (2.8)$$

---

<sup>1</sup>Ver por qué

Cada vez que se quiere obtener un intervalo de predicción en un nuevo conjunto de covariables se tienen que recalcular los pasos Ecuación 2.4, Ecuación 2.5, Ecuación 2.6 y Ecuación 2.8. En la práctica, se restringen los valores de  $y$  a una grilla discreta.

El procedimiento para obtener el intervalo se puede resumir en el Algoritmo 1.

---

**Algoritmo 1:** Intervalo de predicción conformal

---

**Entrada:** Datos  $(X_i, Y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , nivel de no cobertura  $\alpha \in (0, 1)$ , algoritmo de regresión  $\mathcal{A}$ , puntos  $\mathcal{X}_{nuevo}$  en los que construir intervalos de predicción y valores  $\mathcal{Y}_{prueba} = \{y_1, y_2, \dots\}$  para comparar con la predicción.

**Salida:** Intervalos de predicción, en cada elemento de  $\mathcal{X}_{nuevo}$

```

1 for  $x \in \mathcal{X}_{nuevo}$  do
2   for  $y \in \mathcal{Y}_{prueba}$  do
3      $\hat{\mu}_y = \mathcal{A}(\{(X_1, Y_1), \dots, (X_n, Y_n), (x, y)\})$ 
4      $R_{y,i} = |Y_i - \hat{\mu}_y(X_i)|$ ,  $i = 1, \dots, n$  y  $R_{y,n+1} = |y - \hat{\mu}_y(x)|$ 
5      $\pi(y) = (1 + \sum_{i=1}^n \mathbb{I}\{R_{y,i} \leq R_{y,n+1}\}) / (n + 1)$ 
6    $C_{conf}(x) = [y \in \mathbb{R} : (n + 1)\pi(Y_{n+1}) \leq \lceil (1 - \alpha)(n + 1) \rceil]$ 
7 Se devuelve  $C_{conf}(x)$  para cada  $X \in \mathcal{X}_{nuevo}$ .
```

---

### 2.3.1 Teorema

El intervalo Ecuación 2.8 tiene cobertura válida para muestras finitas por construcción y a su vez no presenta sobre cobertura. Esto se puede expresar mediante las expresiones Ecuación 2.9 y Ecuación 2.10, respectivamente:

Sea  $(X_i, Y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  v.a. i.i.d, entonces para la nueva observación i.i.d.  $(X_{n+1}, Y_{n+1})$ :

$$P(Y_{n+1} \in C_{conf}(X_{n+1})) \geq 1 - \alpha \quad (2.9)$$

Adicionalmente, si se hace el supuesto que para todo  $y \in \mathbb{R}$  los residuos dentro de la muestra  $R_{y,i} = |Y_i - \hat{\mu}_y(X_i)|$ ,  $i = 1, \dots, n$  tienen una distribución conjunta continua se cumple que:

$$P(Y_{n+1} \in C_{conf}(X_{n+1})) \leq 1 - \alpha + \frac{1}{n + 1} \quad (2.10)$$

*Observación.* Nótese que las probabilidades aquí, al tomarse sobre la muestra aumentada i.i.d. implican cobertura promedio (o marginal). Esto no es lo mismo que la cobertura condicional  $P(Y_{n+1} \in C_{conf}(x) | X_{n+1} = x) \geq 1 - \alpha \ \forall \ x \in \mathbb{R}^d$ . Esta última es una propiedad más fuerte y no puede lograrse con intervalos predictivos de amplitud finita sin que el modelo y el estimador cumplan condiciones de regularidad y consistencia.

*Observación.* Si se mejora el estimador  $\hat{\mu}$ , en general el intervalo de predicción conformal decrece en tamaño. Esto se da debido a que un  $\hat{\mu}$  más preciso lleva a residuos más pequeños y los intervalos conformales están definidos por los cuantiles de la distribución aumentada de los residuos.

## 2.4 Intervalos de predicción conformales con muestras separadas

Un problema práctico de los intervalos de inferencia conformal de la sección anterior es que tienen mucho costo computacional. Para poder concluir si  $y \in C_{conf}(X_{n+1})$ , para cualquier  $X_{n+1}$  y  $y$ , se tiene que reestimar el modelo en la muestra aumentada que incluye el nuevo punto  $X_{n+1}$  y recalcular y reordenar los nuevos residuos obtenidos.

Para enfrentar esta problemática se puede hacer uso de una metodología denominada por Lei et al. (2016) como predicción conformal separada (*split conformal prediction*). Su costo computacional es menor (es el del paso de estimación únicamente) y tiene menos requerimientos de memoria (solo hay que guardar las variables seleccionadas cuando se evalúa el ajuste en los nuevos puntos  $X_i$ ,  $i \in \mathcal{J}_2$ ). Se presenta en el Algoritmo 2.

---

**Algoritmo 2:** Intervalos de predicción conformales con muestras separadas

---

**Entrada:** Datos  $(X_i, Y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$ , nivel de no cobertura  $\alpha \in (0, 1)$ , algoritmo de regresión  $\mathcal{A}$ .

**Salida:** Intervalos de predicción, sobre  $x \in \mathbb{R}^d$

- 1 Se separa la muestra al azar en dos subconjuntos de igual tamaño  $\mathcal{J}_1$  e  $\mathcal{J}_2$ .
  - 2  $\hat{\mu}_y = \mathcal{A}(\{(X_i, Y_i) : i \in \mathcal{J}_1\})$
  - 3  $R_i = |Y_i - \hat{\mu}_y(X_i)|$ ,  $i \in \mathcal{J}_2$
  - 4  $d$  es el  $k$ -ésimo valor más pequeño en  $\{R_i : i \in \mathcal{J}_2\}$ , donde  $k = \lceil (n/2 + 1)(1 - \alpha) \rceil$
  - 5 Se devuelve  $C_{split}(x) = [\hat{\mu} - d, \hat{\mu} + d]$  para todo  $x \in \mathbb{R}^d$ .
- 

### 2.4.1 Teorema

Sea  $(X_i, Y_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  v.a. i.i.d, entonces para la nueva observación i.i.d.  $(X_{n+1}, Y_{n+1})$ :

$$P(Y_{n+1} \in C_{split}(X_{n+1})) \geq 1 - \alpha \quad (2.11)$$

Adicionalmente, si se hace el supuesto que los residuos  $R_i$ ,  $i \in \mathcal{J}_2$  tienen una distribución conjunta continua se cumple que:

$$P(Y_{n+1} \in C_{split}(X_{n+1})) \leq 1 - \alpha + \frac{2}{n+2} \quad (2.12)$$

### 2.4.2 Teorema

Los intervalos de predicción conformales con muestras separadas dan una garantía aproximada de cobertura dentro de la muestra. Esto se puede expresar como que existe una constante  $c > 0$  tal que, para cualquier  $\epsilon > 0$ :

$$P \left( \frac{2}{n} \sum_{i \in \mathcal{I}_2} \mathbb{I}\{Y_I \in C_{split}(X_i) - (1 - \alpha) \geq \epsilon\} \right) \leq 2 \exp(-cn^2(\epsilon - 4/n)^2) \quad (2.13)$$

Esto implica cobertura dentro de la muestra para la muestra  $\mathcal{I}_2$ , revirtiendo los roles de  $\mathcal{I}_1$  e  $\mathcal{I}_2$  se puede extender para toda la muestra.

*Observación.* También se puede aplicar este método con una separación no balanceada de la muestra, con  $|\mathcal{I}_1| = \rho n$  e  $|\mathcal{I}_2| = \rho n$ , para  $\rho \in (0, 1)$ . Esto puede ser útil en situaciones donde el procedimiento de regresión es complejo y puede resultar beneficioso elegir  $\rho > 0,5$ , para que  $\hat{\mu}$  sea más preciso.

## 2.5 Intervalos conformales con múltiples separaciones de la muestra

Al considerar diferentes divisiones estamos introduciendo una fuente **adicional** de aleatoriedad a nuestra estimación, por tanto, el método de dividir la muestra reduce el costo computacional pero introduce ruido provocando una mayor incertidumbre en nuestras predicciones.

Una manera de corregirlo es combinar las diferentes inferencias realizadas en  $N$  particiones independientes, construyendo así,  $C_{split,1}, \dots, C_{split,N}$ , en donde cada intervalo es construido a un nivel de significación  $\alpha^* = 1 - \alpha/N$  y su relación esta dada de la siguiente manera:

$$C_{split}^N(x) = \cap_{j=1}^N C_{split,j}(x) \quad x \in R^d$$

Como se puede apreciar, al utilizar este procedimiento hay un precio que debemos de pagar, los intervalos se vuelven mas anchos a medida que  $N$  crece, esto puede verse de la siguiente manera:

Como sabemos, la cobertura marginal de nuestra predicción tiene una cobertura de al menos  $1 - \alpha$  por construcción, además con el algoritmo 2 podemos acotar aún mas esta probabilidad:

$$1 - \alpha \leq P(Y_{n+1} \in C_{split}(X_{n+1})) \leq 1 - \alpha + \frac{2}{n+2} \leq 1 \quad (2.14)$$

En nuestro caso, cada partición esta construida con un nivel de significación  $\alpha^* = \alpha/N$ , por tanto remplazando esta identidad en 2.14:



$$1 - \frac{\alpha}{N} \leq P(Y_{n+1} \in C_{split}(X_{n+1})) \leq 1 - \underbrace{\frac{\alpha}{N}}_{\sim 0 \text{ Si } N \text{ aumenta}} + \frac{2}{n+2} \leq 1$$

## 2.6 Intervalos predictivos mediante Jackknife

## 3 Aplicación

## 4 Conclusión

Es importante considerar que bajo esta estructura de construcción de intervalos

## 5 Bibliografía

Lei, J., G'Sell, M., Rinaldo, A., Tibshirani, R. J., & Wasserman, L. (2016). *Distribution-Free Predictive Inference For Regression*. arXiv. <https://doi.org/10.48550/ARXIV.1604.04173>

## **6 Anexo**