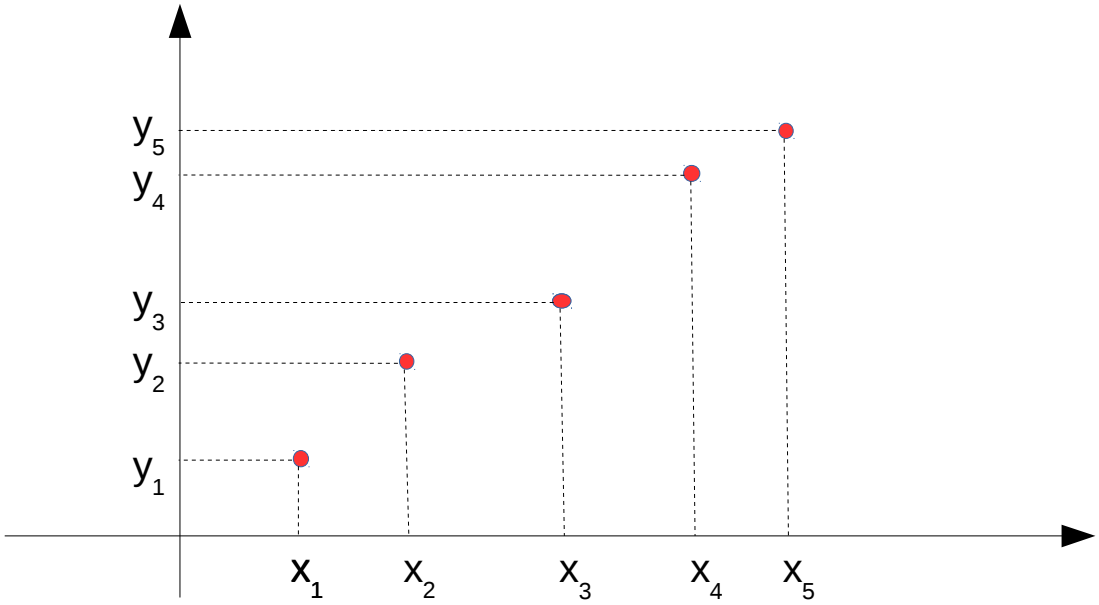
Tema 6. Modelos de regresión. Estimación de máxima verosimilitud.

Modelado estadístico

- Uno de los objetivos de la estadística consiste en modelizar procesos que involucran variables estadísticas.
- Supongamos un estadístico **"y"** que depende de un parámetro **"x"** tal y como se muestra en la gráfica.
- Puesto que son variables estadísticas, para una x dada, su comportamiento vienen dados por **pdf(y | x).**
- Si además conocemos cómo es la distribución de **"x"** tenemos que **pdf(y, x) = pdf(y | x) pdf(x).**
- Y el último ingrediente que tenemos es que los valores de x e y están correlacionados por alguna función.

$$E[y|x]=f(x)$$

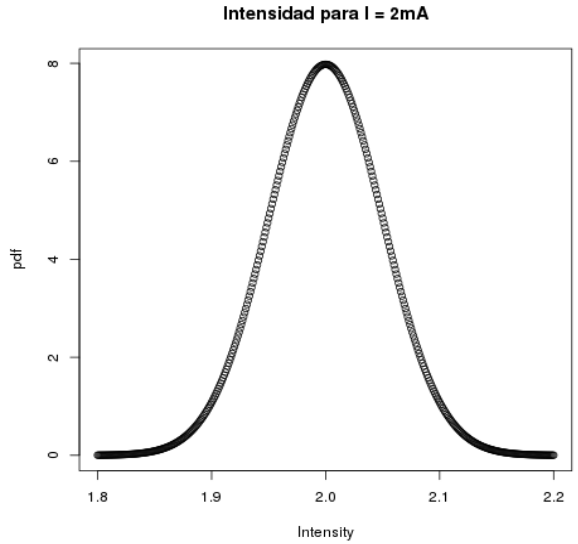
M = {(x1, y1), (x2, y2), (x3, y3), (x4, y4), (x5, y5)}

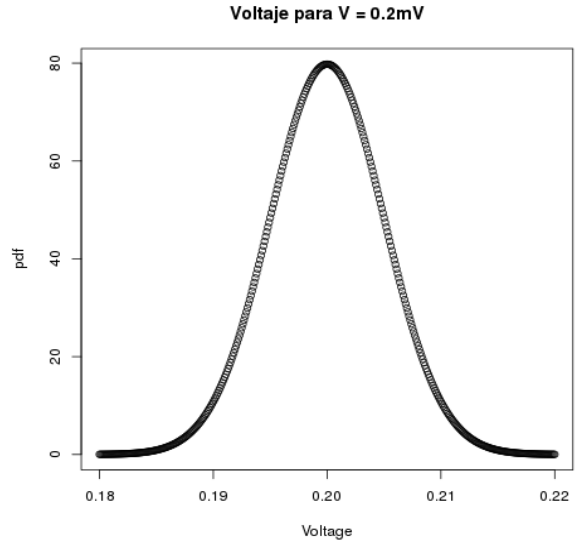


Modelado estadístico: ejemplo (I)

- Supongamos dos variables estadísticas de origen físico: **Voltaje** e **Intesidad** medidas en un circuito.
- Sabemos que ambas magnitudes están relacionadas a través de la resistencia: **V = I R (ley de Ohm).**
- Supongamos un circuito en el que fijamos la intensidad al valor I_0 y medimos ambos V e I.
- Debido a la acumulación de errores/resolución lo más probable es que las medidas sigan distribuciones:

$$pdf\left(V|I_0=2\,mA\right)\propto N\left(\mu_I=2\,mA,\sigma_I=0.05\,mA\right)N\left(\mu_I=0.2\,mV,\sigma_I=0.005\,mV\right)con\,\mu_I=R\,\mu_V$$



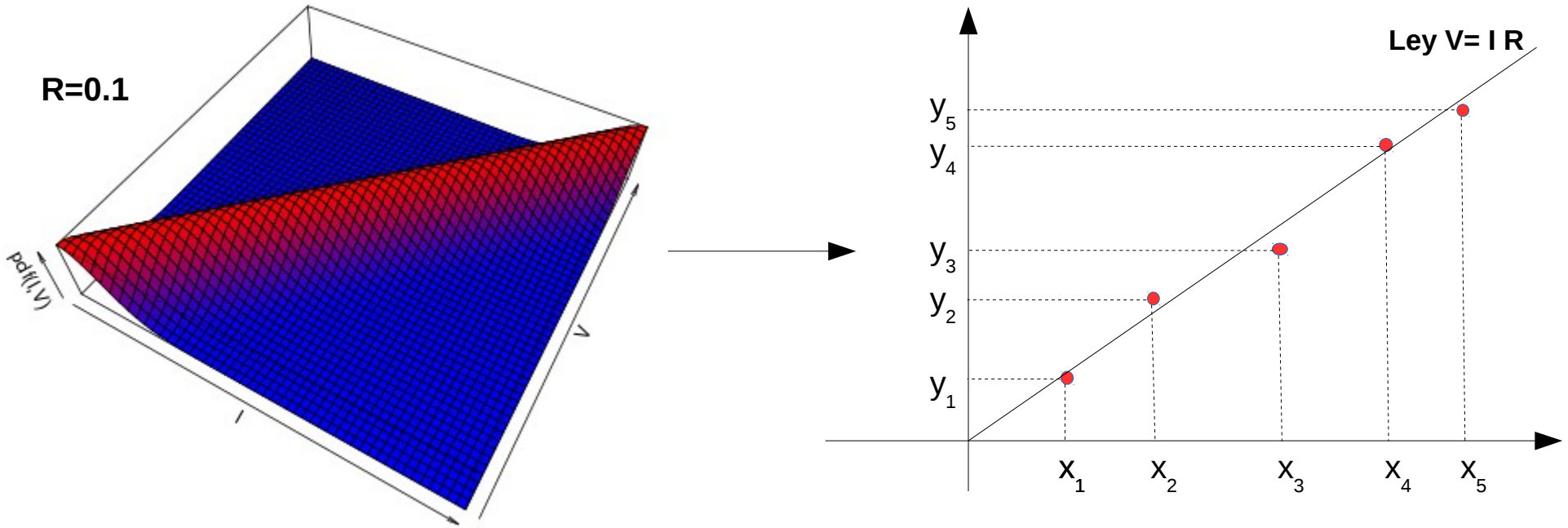


R=0.1

Modelado estadístico: ejemplo (II)

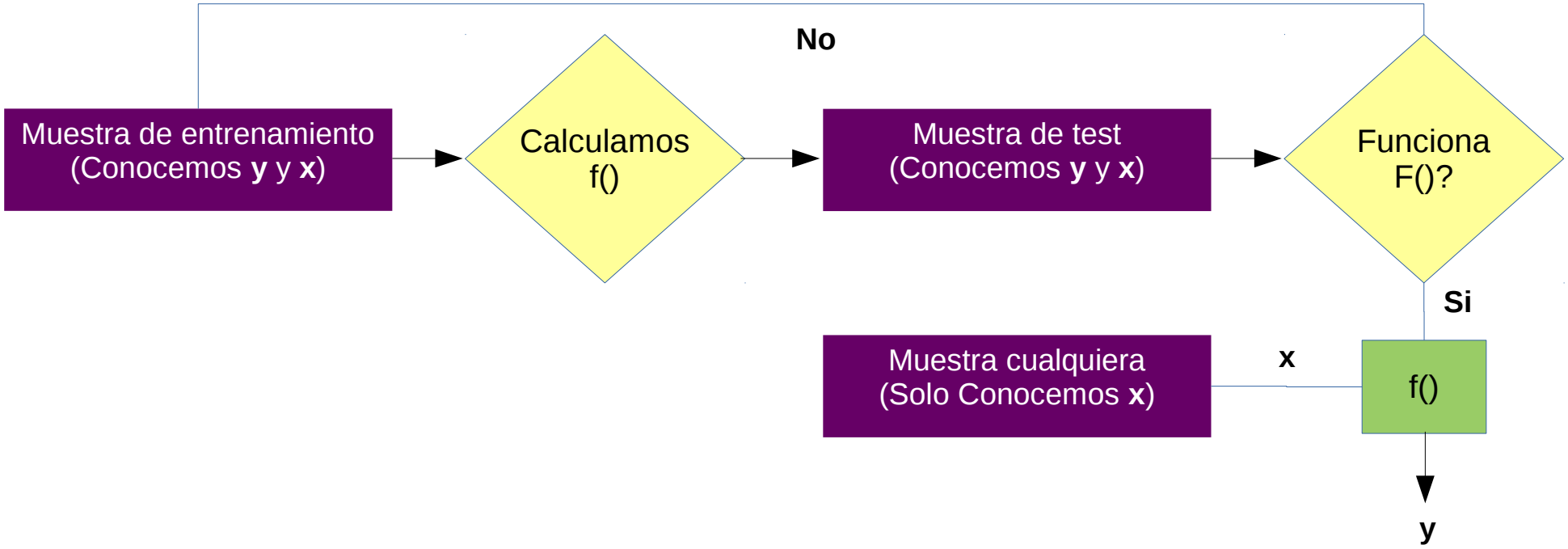
- Si además asumimos por ejemplo que sampleamos la intensidad de manera uniforme tendremos:

$$pdf(V,I) = pdf(V|I)\,pdf(I) \propto N(\mu_I = I, \sigma_I = 0.05\,mA)\,N(\mu_V = RI, \sigma_V = 0.005\,mV)$$



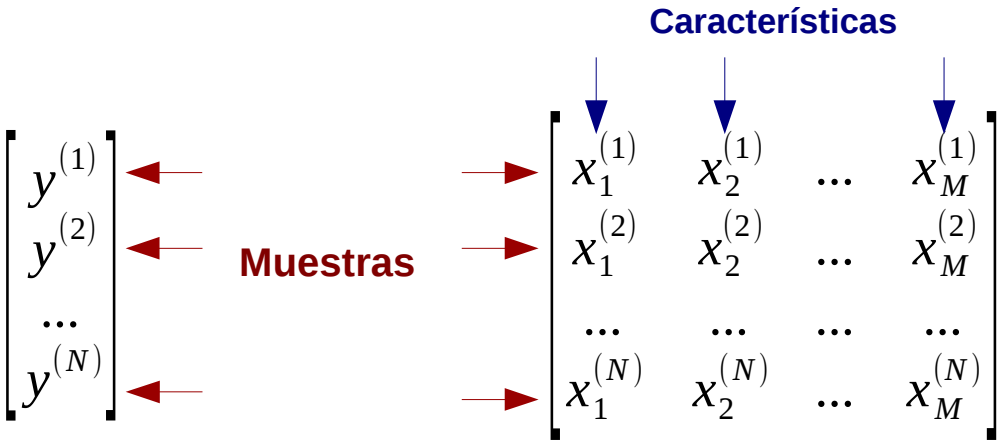
Modelado estadístico: objetivo

- El modelado estadístico persigue encontrar la relación $y = f(x)$ a partir de una muestra concreta de datos.
- Esto con frecuencia consiste en encontrar los parámetros que caracterizan a $f \rightarrow y = f(x, \Theta)$
- El objetivo final del modelado tiene que ver con la capacidad posterior de predecir nuevas situaciones.



Algunas definiciones

- Una vez visto el contexto estadístico del problema a resolver vamos con algunas definiciones
- A la variable bajo estudio la llamaremos la **"variable dependiente" y**
- A las variables de las que depende y las llamaremos características o **"features" $x_1,x_2,x_3,x_4,x_5,x_6,\ldots,x_M$**
- Cuando tenemos una muestra concreta de N datos diferentes con frecuencia agrupamos en matrices



- Un modelo es cualquier función f() que asigna un valor y a un vector de características **y = f($x_1,\ldots,x_M$).**
- Un **parámetro** del modelo es una cantidad fija de la que depende el modelo. **Ejemplo anterior: R**

Métricas y función de coste

- El objetivo del modelado es encontrar la función que mejor “describa” nuestros datos.
- Resulta evidente que para ello necesitamos cuantificar la adecuación de un modelo a los datos.
- Para ello comenzamos definiendo una **métrica** que nos permita cuantificar la similitud entre 2 datos.
- Supongamos por ejemplo que tenemos dos realizaciones de la variable dependiente $y^{(1)}$ y $y^{(2)}$
- Podemos cuantificar su similitud utilizando la **distancia entre ambos** (euclidea por ejemplo):

$$d = \| y^{(1)} - y^{(2)} \|$$

- Si conocemos para un experimento x y y podemos ver como de bien predice nuestro modelo

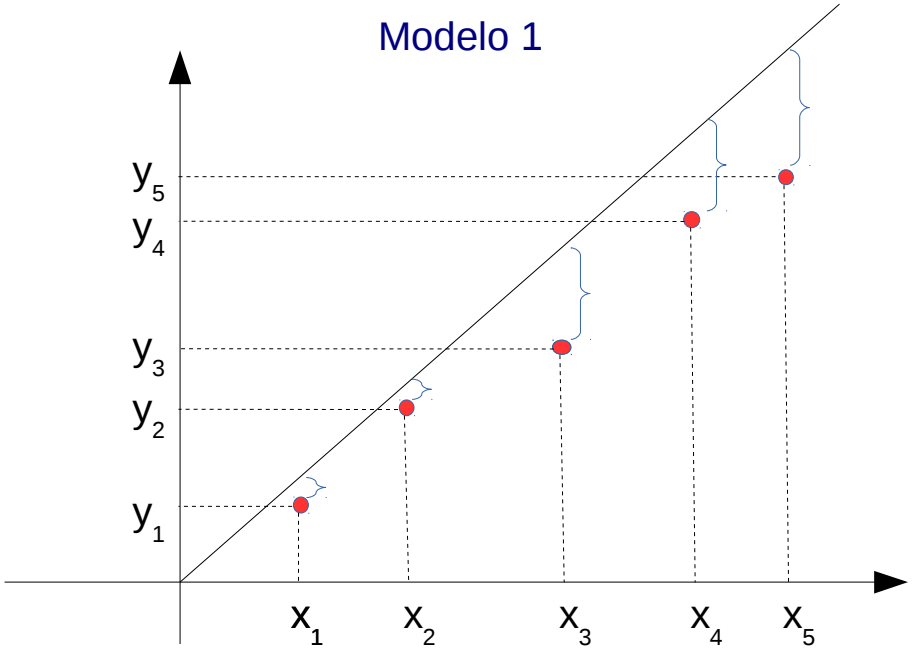
$$d = \| y^{(1)} - f\left(x_1^{(1)}, \ldots, x_M^{(1)}, \Theta\right) \|$$

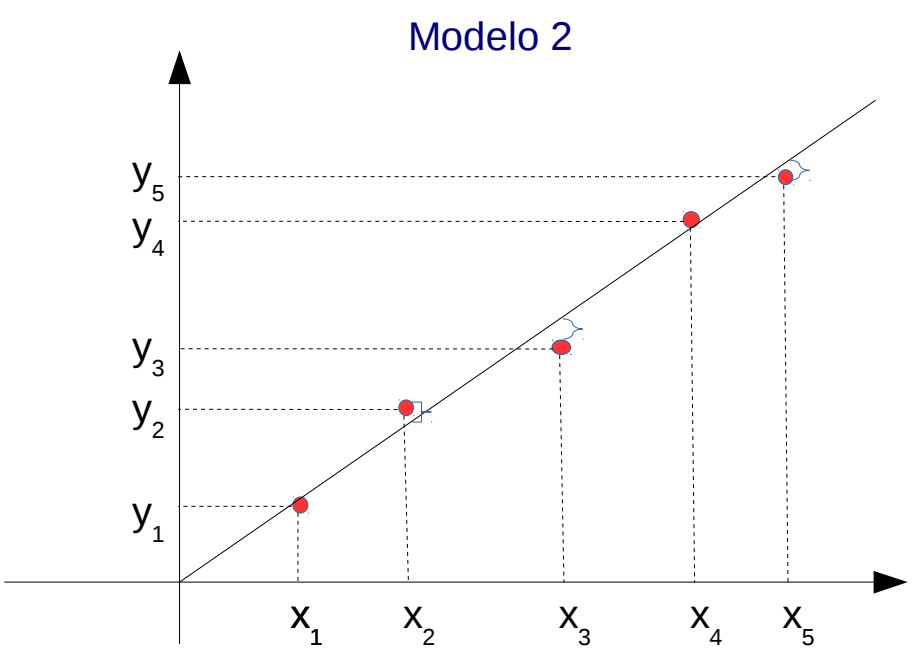
- Pero si además disponemos de una muestra de N elementos podemos calcular la distancia total

$$cost = \sum_{i=1}^{N} \| y^{(i)} - f\left(x_1^{(i)}, \ldots, x_M^{(i)}, \Theta\right) \| \quad \longleftarrow \quad \textbf{Funcion de coste}$$

Métricas y función de coste: Ejemplos

- Supongamos que tenemos dos modelos lineales: $y = a_1 x$ y $y = a_2 x$
- **La función de coste mide la adecuación de un modelo concreto a los datos observados.**





Función de coste alta para el modelo con $y = a_1 * x$

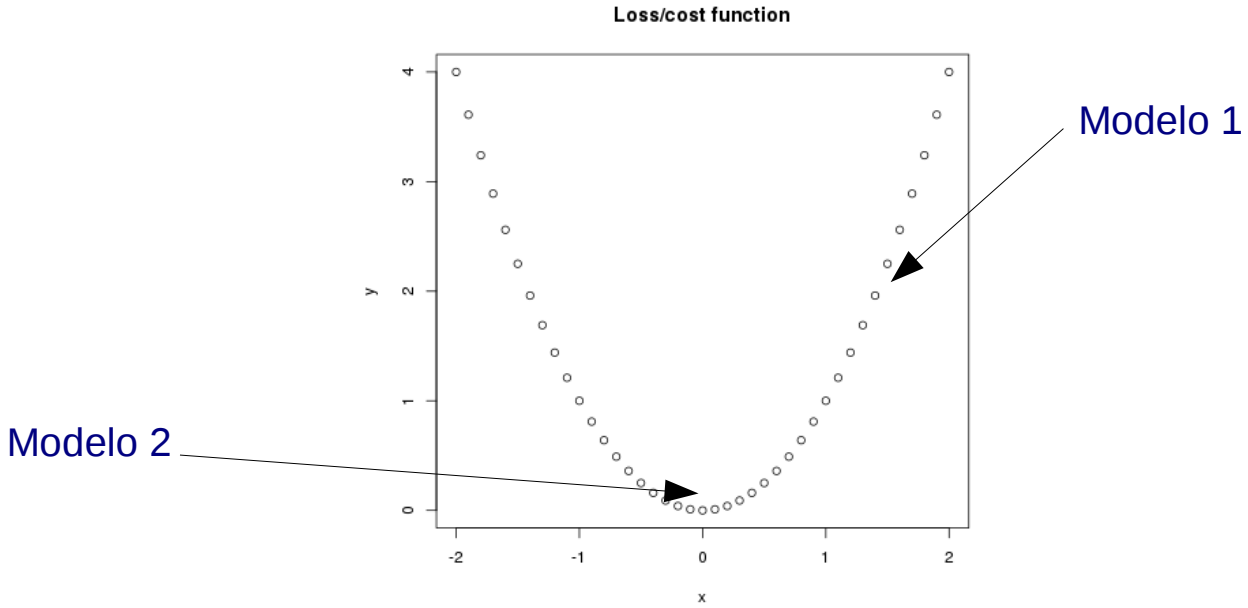
Función de coste baja para el modelo con $y = a_2 * x$

Minimización de la función de coste

- Una vez obtenida la función de coste, lo que necesitamos **es encontrar aquel modelo que la minimice**
- Recordemos que la función de coste depende de la muestra de entrenamiento y del parámetro/s

$$loss\left(y^{(1)}, y^{(2)}, \ldots, y^{N}, x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \ldots, x_M^{(N)}, \Theta_1, \Theta_2, \Theta_3\right)$$

- Cuando hablamos de minimizar nos referimos a minimizar en relación a los parámetros.

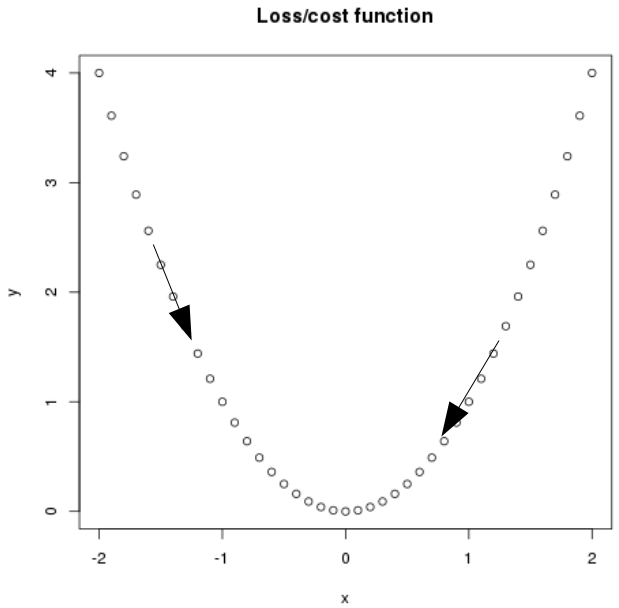


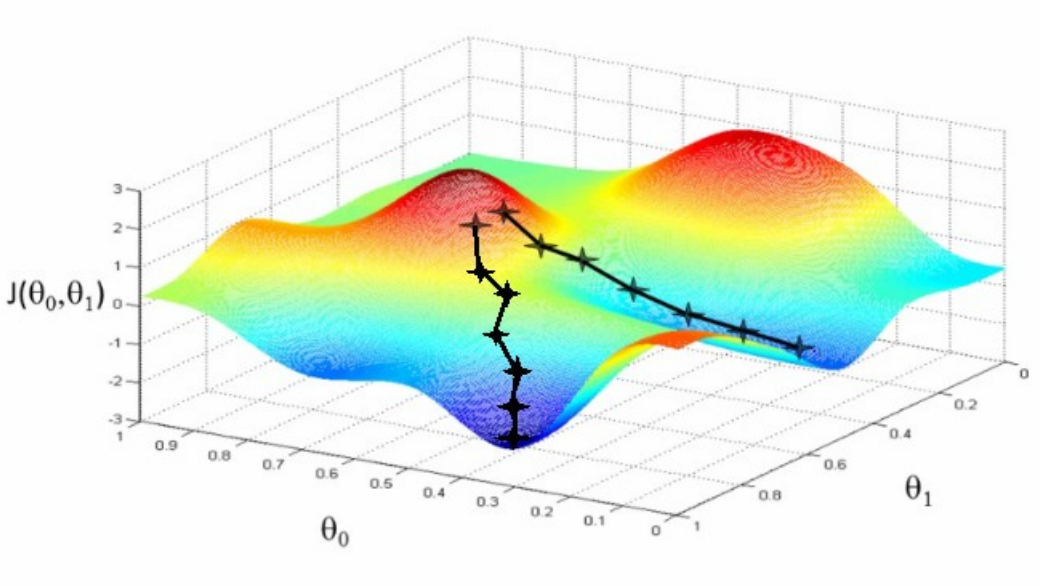
¿Cómo se minimiza una función?

- La técnica más utilizada para minimizar una función se conoce como **"gradient descent"**
- Utiliza una propiedad matemática: el gradiente de una función apunta en la dirección de máxima variación.
- Si calculamos por lo tanto el gradiente de la función de loss nos dirá en qué dirección la función disminuye.

$$\nabla_\Theta loss = \frac{\partial loss}{\partial \Theta_i}$$

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n + \Lambda \nabla_\Theta loss$$





- Para problemas con muchas dimensiones se utiliza aún más el **"stochastic gradient descent"**

Regresión lineal

- Un caso muy particular de regresión es la conocida como regresión lineal en la que el modelo es lineal.

$$y = f(x_1, \ldots, x_M) = \alpha_0 \cdot 1 + \alpha_1 \cdot x_1 + \alpha_2 \cdot x_2 + \ldots + \alpha_M \cdot x_M$$

- Si tuviésemos una muestra de varios pares (y, x) podemos escribir la predicción para cada uno de ellos:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1^{(1)} & x_2^{(1)} & \ldots & x_M^{(1)} \\ 1 & x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & \ldots & x_M^{(2)} \\ 1 & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_1^{(N)} & x_2^{(N)} & \ldots & x_M^{(N)} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \ldots \\ \alpha_M \end{bmatrix}$$

- Llamando genericamente a esa matriz X y al vector α podemos escribir el vector predicho como $y\_p = X\alpha$

- Y por lo tanto, si usamos como **función de coste** el cuadrado de la distancia euclidea tenemos que:

$$Loss = (y - X\alpha)^T (y - X\alpha)$$

Ejercicio 3

- Consideremos un sistema en el que existe una característica x y una variable dependiente y que se relacionan como y = a * x. Supongamos también que para cada valor fijo de **x** la medida **y** viene dada por una pdf gaussiana centrada en a * x y con sigma. Escribe una funcion de R que tome como input un vector aleatorio de N elementos de x que tome valores entre [0, 10], el factor a, y sigma; y genere el correspondiente vector y.

- Una vez terminada la función genera el vector x con N = 100, y un vector y con a = 2 y sigma = 0.2. Pintalos en una grafica.

- Escribe una función en R a la que le pases un vector y dependiente, un vector x con la caracteristica, y un parametro a y te devuelva el valor de la loss function para ese valor del parámetro a.

- Llama a la función anterior con diferentes valores del parámetro a, y pinta la curva de la loss function en función de a. Comprueba visualmente que el mínimo está en la posición que nos esperamos.