

Machine Learning

Armando Rivera

8 de marzo de 2019

Índice general

1. Introducción	5
1.1. Qué es Machine Learning	6
1.2. Aprendizaje Supervisado	6
1.3. Aprendizaje no supervisado	10
2. Regresión Lineal con una variable	11
2.1. Modelo y función de costo	11
2.1.1. Modelo y representación	11
2.1.2. Función de costo	12
2.2. Parámetro de aprendizaje	13
2.2.1. Descenso de gradiente	13
3. Regresión lineal con múltiples variables	15
3.1. Múltiples características	15
3.2. Escalamiento de características	16
3.3. Índice de aprendizaje	17
3.4. Características y regresión polinomial	17
3.5. Ecuación Normal	18

Índice de figuras

1.1. Ejemplo de aprendizaje supervisado	7
1.2. Ejemplo de clasificación	8
1.3. Problema de clasificación con dos variables	9
2.1. Precios y tamaño de casas	11
2.2. Gráfica x-y	12
2.3. Minimización de $J(\theta_0, \theta_1)$	13
2.4. Función de costo para una regresión lineal	14
3.1. Regresión polinomial	17

Índice de tablas

2.1. Relación precio-área	12
3.1. Múltiples características	15
3.2. Datos de casas	18

Acerca de este manual

Este manual fue hecho para guiar a las personas que quieren introducirse al mundo del Machine Learning, este manual es una recopilación del material escrito y en video del curso disponible en la plataforma Coursea por la Universidad de Stanford impartido por Andrew Ng a quien se le da el crédito por el material proporcionado.

Capítulo 1

Introducción

El aprendizaje automático es una de las nuevas tecnologías más emocionantes. Cada vez que usas un buscador web como Google o Bing para hacer una búsqueda en internet, una de las razones por las que funciona tan bien es porque un algoritmo de aprendizaje, implementado por Google o Microsoft, ya aprendió a clasificar las páginas web. Cada vez que usas Facebook o que la aplicación de fotos de Apple reconoce las fotos de tus amigos, eso es aprendizaje automático.

Cada vez que lees tu correo electrónico o que tu filtro de spam te salva de tener toneladas de correo basura, eso también es un algoritmo de aprendizaje.

¿Por qué predomina el aprendizaje automático hoy en día? Resulta que el aprendizaje automático es un campo que nació a partir de la IA o inteligencia artificial. Queríamos construir máquinas inteligentes y resulta que hay pocas cosas básicas que podemos programar para que haga una máquina como encontrar la ruta más corta de A a B. Pero en gran medida no sabíamos cómo hacer programas de IA para hacer cosas más interesantes como buscar en la web, etiquetar fotos o antispam. Se comprendió que la única forma de hacer estas cosas era que una máquina aprendiera a hacerlas por sí misma. Así que el aprendizaje automático se desarrolló como una nueva capacidad para las computadoras y hoy está en muchos sectores de industria y ciencia básica.

Veamos otros ejemplos de aprendizaje automático. Existe la minería de datos. Una de las razones por las que el aprendizaje automático se ha difundido es el crecimiento de la web y de la automatización, es decir, que ahora tenemos más datos que nunca. Por ejemplo, hoy en día muchas empresas en Silicon Valley recolectan datos de clics, también llamados datos de tráfico, y tratan de usar algoritmos de aprendizaje electrónico para explorar estos datos y entender mejor a los usuarios y darles mejor servicio. Actualmente es un gran segmento de Silicon Valley. Expedientes médicos. Ahora con la llegada de la automatización, tenemos expedientes médicos electrónicos, entonces si convertimos los expedientes médicos en conocimientos médicos, empezaremos a entender mejor la enfermedad. Biología informática. También con la automatización los biólogos recolectan muchos datos sobre la secuencia genética, secuencias de ADN, etc. y los algoritmos de aprendizaje automático nos ayudan a entender mejor el genoma humano y qué significa ser humano. También en ingeniería, en todas las áreas de ingeniería, tenemos conjuntos de datos cada vez más y más grandes, que tratamos de entender mediante algoritmos de aprendizaje.

Actualmente, la mayoría del procesamiento de lenguaje natural y de visión por computadora aplica aprendizaje automático. Los algoritmos de aprendizaje se utilizan mucho en los programas de auto-personalización. Cada vez que entras a Amazon, Netflix o iTunes Genius y te recomienda películas, productos y música, eso también es un algoritmo de aprendizaje. Si lo piensas, tienen millones de usuarios; no hay forma de crear un millón de programas distintos para esos usuarios. La única manera de que el software genere estas recomendaciones personalizadas es que pueda aprender por sí mismo tus preferencias. Por último, los algoritmos de aprendizaje se usan hoy en día para entender el aprendizaje humano y para entender el cerebro. Hace algunos meses, un estudiante me mostró un artículo.

1.1. Qué es Machine Learning

Entre los practicantes del aprendizaje automático no existe una definición bien aceptada sobre lo que es y lo que no es aprendizaje automático.

Pero vamos a ver un par de ejemplos sobre las maneras en que la gente ha intentado definirlo. Esta es la definición sobre qué es aprendizaje automático para **Arthur Samuel**. Definió el aprendizaje automático como *el campo de estudio que le da a los ordenadores la habilidad de aprender algo sobre lo que no han sido explícitamente programados*.

La fama de Samuel se remonta a la década de 1950, cuando escribió un programa para jugar a las damas. Y lo asombroso sobre este programa que juega a las damas era que el propio Arthur Samuel no era un buen jugador de damas. Pero lo que él hizo fue, tener un programa para jugar decenas de miles de partidas contra si mismo. Y observando que tipo de posiciones en el tablero tienden a conducir a la victoria y que tipo de posiciones en el tablero tienden a perder.

El programa de juego de damas aprende con el tiempo que posiciones son buenas en el tablero y cuales son malas posiciones. Y, finalmente, aprender a jugar a las damas mejor de lo que el propio Arthur Samuel era capaz. Esto fue un resultado notable. Aunque el propio Samuel resultó no ser un jugador de damas muy bueno. Pero debido a que el ordenador tiene la paciencia para jugar decenas de miles de partidas contra él mismo. Ningún humano tiene la paciencia para jugar esa cantidad de partidas. De esta manera el ordenador fue capaz de obtener una gran experiencia jugando a las damas que, finalmente llegó a ser mejor jugador que el propio Arthur Samuel.

Esta es una definición un tanto informal, y algo más antigua. Aquí está una definición un poco más reciente de **Tom Mitchell**, Entonces Tom define el aprendizaje automático diciendo que, *Un programa de ordenador se dice que aprende de la experiencia E , con respecto a T , y alguna medida de rendimiento P . Y si esta actuación en T , medida por P mejora la experiencia E .*

Para el ejemplo de jugadores de damas, la experiencia E , será la experiencia de tener el programa jugando decenas de miles de partidas reiteradas contra él mismo. La tarea T , será la tarea de jugar partidas. Y la medida de mejora P , será la probabilidad que lo haga ganar la siguiente partida de damas contra un nuevo oponente.

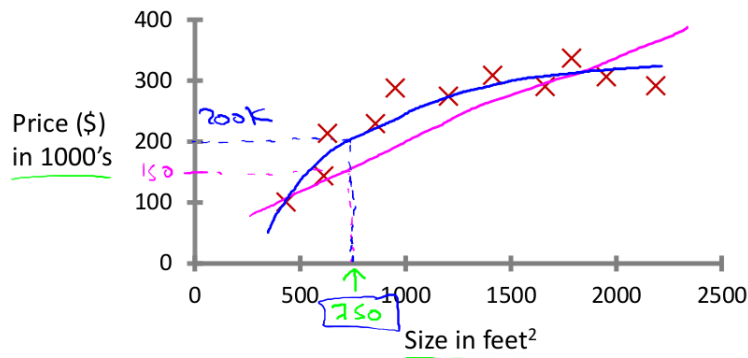
1.2. Aprendizaje Supervisado

Supongamos que quieres predecir precios de casas. Y digamos que trazas un conjunto de datos y se ve así. En la figura 1.1 tenemos en el eje horizontal, el tamaño de distintas casas en pies cuadrados, y en el eje vertical, el precio de distintas casas en miles de dólares. Entonces, con estos datos, digamos que tienes un amigo que tiene una casa de 750 pies cuadrados y desea venderla y quiere saber cuánto dinero puede obtener por ella. Entonces, ¿cómo puede ayudarte un algoritmo de aprendizaje?

Algo que podría hacer el algoritmo de aprendizaje es trazar una línea recta a través de los datos o insertar una línea recta en los datos y, con base en eso, resulta que tal vez la casa pueda venderse en aproximadamente \$150,000. Pero tal vez este no es el único algoritmo de aprendizaje que puedes usar. Puede haber uno mejor. Por ejemplo, en lugar de trazar una línea recta en los datos, podríamos decidir que es mejor insertar una función cuadrática o un polinomio de segundo grado a estos datos. Y si haces eso y haces una predicción aquí, entonces resulta que tal vez puede vender la casa en casi \$200,000.

el término aprendizaje supervisado se refiere al hecho de que le dimos al algoritmo un conjunto de datos donde se daban las “respuestas correctas”. Es decir, le dimos un conjunto de datos de casas en los que para cada ejemplo del conjunto de datos, se dijo cuál era el precio correcto, el precio real al que se vendió esa casa y la tarea del algoritmo sólo fue generar más “respuestas correctas” como para esta casa nueva que tu amigo está queriendo vender. Para definir un poco más la terminología, esto también se denomina un problema de regresión y con esto quiero decir que

Housing price prediction.



Supervised Learning

"right answers" given

Regression: Predict continuous valued output (price)

Figura 1.1: Ejemplo de aprendizaje supervisado

queremos predecir un resultado de valor continuo. Es decir, el precio. Así que, técnicamente, creo que puede redondearse el precio al centavo más cercano. Tal vez los precios en realidad son valores discretos, pero en general pensamos en el precio de una casa como un número real, un valor escalar, un número de valor continuo, y el término regresión se refiere al hecho de que tratamos de predecir el tipo de atributo valuado de forma continua.

Digamos que quieres revisar expediente médicos y tratar de predecir cáncer de mama como maligno o benigno.

Un tumor maligno es un tumor dañino y peligroso y un tumor benigno es un tumor inofensivo. Veamos en la Figura 1.2 un conjunto de datos recolectados y supongamos que en estos datos, en el eje horizontal tienes el tamaño del tumor y en el vertical, sí o no, si o no son ejemplos de tumores, el uno si es maligno o el cero si no es maligno.

Supongamos que nuestro conjunto de datos se ve así donde vemos algunos tumores de varios tamaños que resultaron ser benignos.

Por desgracia, también vemos unos tumores malignos. Así que en este ejemplo tengo cinco ejemplos de tumores benignos que se muestran abajo y cinco de tumores malignos que se muestran con un valor del eje vertical de uno.

Y digamos que tenemos una amiga que lamentablemente tiene un tumor mamario y supongamos que su tamaño es de aproximadamente del valor mostrado con la flecha magenta en la figura 1.2. La pregunta de aprendizaje automático es: ¿puedes calcular cuál es la probabilidad, de que un tumor sea maligno versus benigno?

Para mostrar un poco de terminología, este es un ejemplo de un problema de clasificación. El término "clasificación" se refiere al hecho de que intentamos predecir un resultado de valor discreto: cero o uno, maligno o benigno. Y resulta que algunas veces en problemas de clasificación, puedes tener más de dos valores para dos posibles valores para el resultado.

Como ejemplo concreto tal vez haya tres tipos de cáncer de mama, por lo que puedes intentar predecir el valor discreto de cero, uno, dos o tres, en el que cero es benigno. Tumor benigno, es decir sin cáncer. Y uno puede significar un tipo de cáncer, si tienes tres tipos de cáncer, lo que sea que signifique el tipo uno. Y dos puede significar un segundo tipo de cáncer y tres puede ser un tercer tipo de cáncer. Pero esto también sería un problema de clasificación, debido al otro conjunto

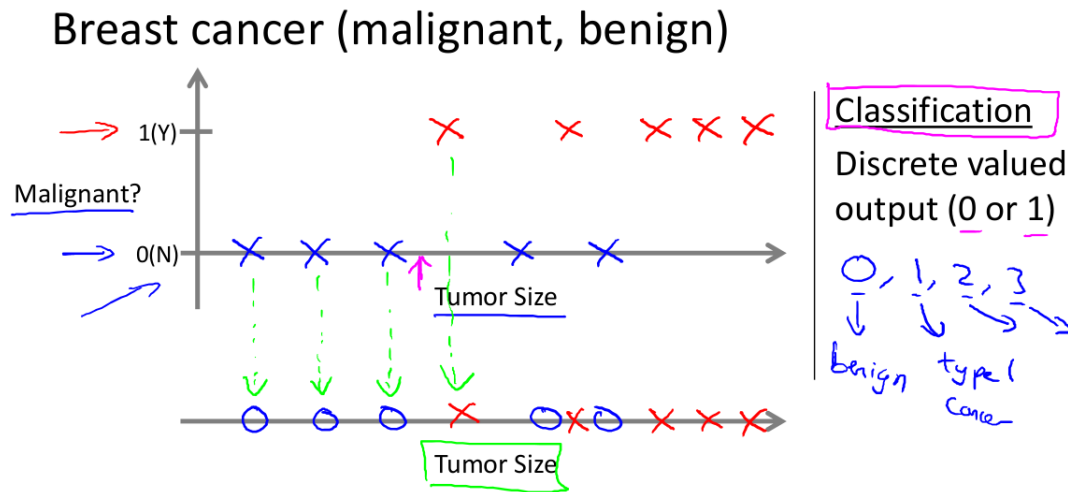


Figura 1.2: Ejemplo de clasificación

de resultados del valor discreto que corresponde a: sin cáncer o cáncer tipo uno, tipo dos, o cáncer tipo tres.

Existe otra forma de trazar estos datos en los problemas de clasificación. Así que si el tamaño del tumor será el atributo que se usará para predecir si es maligno o benigno, En lugar de dibujar cruces, se dibujarán círculos para los tumores benignos. Y se usarán X para denotar los tumores malignos. Todo lo se hizo fue tomar el conjunto de datos de arriba en la Figura 1.2 y se dibujaron abajo.

En este ejemplo sólo usamos una característica o un atributo, principalmente, el tamaño del tumor para predecir si el tumor es maligno o es benigno.

Digamos que en lugar de sólo saber el tamaño del tumor, también conocemos la edad y el tamaño de tumor de los pacientes. En ese caso, tal vez tu conjunto de datos se verá como en la figura 1.3 y tenemos un conjunto de pacientes cuyos tumores resultaron malignos, como lo indican las cruces.

Así que digamos que tienes un amigo que por desgracia tiene un tumor. Y tal vez, el tamaño del tumor y la edad están más o menos donde indica el punto color magenta. Con un conjunto de datos como este, lo que puede hacer el algoritmo de aprendizaje es trazar la línea recta en los datos para tratar de separar los tumores malignos de los benignos y entonces el algoritmo de aprendizaje puede decidir trazar la línea recta para separar las dos clases de tumores. Y con esto, es posible que puedas decidir que es más probable.

En este ejemplo, tuvimos dos características, la edad del paciente y el tamaño del tumor. En otros problemas de aprendizaje automático con frecuencia tendremos más características como el grosor de acúmulo del tumor mamario, uniformidad del tamaño celular del tumor, uniformidad de la forma celular del tumor, etc., así como otras características. Resulta que para algunos problemas de aprendizaje, lo que realmente no quieres es usar tres o cinco características, sino usar un número infinito de características, un número infinito de atributos, de manera que tu algoritmo de aprendizaje tenga muchos atributos o características o señales para hacer las predicciones. Entonces, ¿cómo manejas un número infinito de características? ¿Cómo almacenas un número infinito de cosas en la computadora cuando sabes que se va a llenar la memoria? Resulta que cuando nos referimos a un algoritmo llamado Máquina de Soporte Vectorial, habrá un truco matemático genial

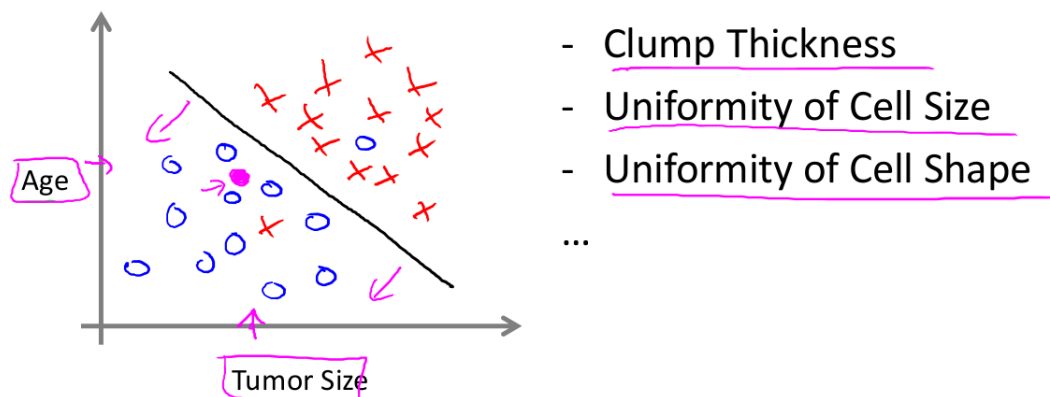


Figura 1.3: Problema de clasificación con dos variables

que permitirá que la computadora maneje un número infinito de características.

En el aprendizaje supervisado, cada ejemplo de nuestro conjunto de datos, nos dice que la “respuesta correcta” que nos habría gustado, la predijeron los algoritmos en ese ejemplo. Como el precio de la casa o si el tumor es maligno o benigno. También hablamos sobre el problema de regresión. Y regresión significa que nuestro objetivo es predecir un resultado de valor continuo. Y hablamos sobre el problema de clasificación, donde el objetivo es predecir el resultado de valor discreto. Solo una pregunta para recapitular: Supongamos que diriges una empresa y quieres desarrollar algoritmos de aprendizaje para enfrentar los dos problemas. En el primer problema, tienes un gran inventario de artículos idénticos. Entonces, imagina que tienes miles de copias de algunos artículos idénticos para vender y quieres saber cuántos de estos artículos venderás en los próximos tres meses. En el segundo problema, el problema dos, tendrás muchos usuarios y querrás diseñar un software para analizar cada una de las cuentas individuales de tus clientes, cada una de las cuentas de tus clientes; y para cada cuenta decidirás si la cuenta fue o no hackeada o estuvo en peligro. Entonces, ¿cada uno de estos problemas debe tratarse como un problema de clasificación o como un problema de regresión?

Por problema uno lo trataría como un problema de regresión, ya que si tuviera miles de artículos, bueno, probablemente lo trataría como un valor real, como un valor continuo. Y por lo tanto, trataría el número de artículos que vendo como un valor continuo. Y para el segundo problema, lo trataría como un problema de clasificación, ya que podría establecer el valor que quiero predecir con cero para denotar que no se hackeo la cuenta. Y establecer el valor en uno para denotar una cuenta que sí fue hackeada. Así como para el cáncer de mama cero es benigno y uno es maligno. Por ello podría establecerlo en cero o uno dependiendo de si se hackeó y hacer que un algoritmo trate de predecir cada uno de estos dos valores discretos. Y debido a que existe un número reducido de valores discretos, entonces lo manejaría como un problema de clasificación.

1.3. Aprendizaje no supervisado

En el aprendizaje no supervisado nos dan el conjunto de datos y no nos dicen qué hacer con eso y no nos dicen cuál es cada punto de datos. En lugar de eso, nos dicen aquí está el conjunto de datos. ¿Puedes encontrar alguna estructura en los datos? Con estos datos, un algoritmo de aprendizaje no supervisado podría decidir que los datos están en dos grupos diferentes. Así que hay un grupo y un grupo diferente. A esto se le llama algoritmo de agrupamiento.

El aprendizaje no supervisado nos sirve para hacer el agrupamiento de datos o clustering, también nos sirve para la reducción de dimensionalidad, por ejemplo si tenemos muchos datos y queremos trabajar únicamente con un sector. Cluster: Se puede trabajar con segmentación de mercado. Sistemas de recomendación. Reducir dimensionalidad: Visualización Big data. Descubrimiento de estructuras. Algoritmos: k-means: k es el número de grupos, cada grupo tendrá un centro (Centroide) y alrededor de este centro se ubicarán datos con características similares.

El aprendizaje no supervisado nos permite abordar problemas con poca o ninguna idea de cómo deberían ser nuestros resultados. Podemos derivar la estructura de datos donde no necesariamente sabemos el efecto de las variables.

Podemos derivar esta estructura agrupando los datos en función de las relaciones entre las variables en los datos.

Con el aprendizaje no supervisado no hay retroalimentación basada en los resultados de la predicción.

Ejemplo:

Agrupación: tome una colección de 1,000,000 de genes diferentes y encuentre una manera de agrupar automáticamente estos genes en grupos que de alguna manera sean similares o estén relacionados por diferentes variables, como la duración de la vida, la ubicación, los roles, etc.

Sin agrupación: el “algoritmo de cóctel”, le permite encontrar la estructura en un entorno caótico. (es decir, identificar voces individuales y música de una malla de sonidos en un cóctel).

Capítulo 2

Regresión Lineal con una variable

La regresión lineal predice una salida de valor real basada en un valor de entrada. Discutimos la aplicación de la regresión lineal a la predicción del precio de la vivienda, presentamos la noción de una función de costo e introducimos el método de pendiente de gradiente para el aprendizaje.

2.1. Modelo y función de costo

2.1.1. Modelo y representación

En la figura 2.1 tenemos datos de los precios de distintas casas con sus respectivas áreas. Supongamos que queremos obtener un dato que no está en la gráfica, por ejemplo, queremos comprar una casa de 1250 (*feet*²) con una aproximación sabremos que nos costará \$220k. La regresión lineal nos permite predecir un valor a partir de otros. La notación que usaremos será la siguiente.

- **m**: Número de datos de entrenamiento.
- $x^{(i)}$: Variables de entrada.
- **y**: Variables de salida

En nuestro ejemplo de las casas nuestras variables de entrada (**x**) serían el área de las casas. Las variables de salida son los precios de dichas casas. Guiándonos en la tabla 2.1 diremos que $X^{(1)} = 2104$ Cabe destacar que el 1 no es un exponente sino un índice. Para obtener la función que mas se adapte a nuestros datos de entrenamiento tenemos que usar la función de hipótesis que se muestra en la ecuación 2.1 donde θ_0 es el punto sobre el eje y donde

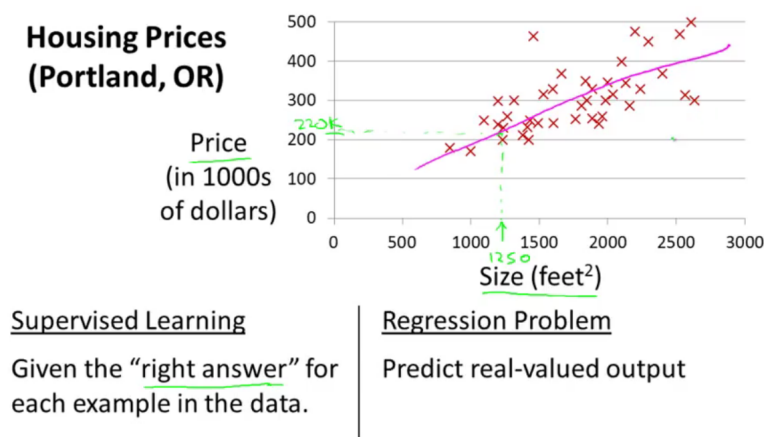


Figura 2.1: Precios y tamaño de casas

Tamaño en $feet^2$ (x)	Precio en 1000 (y)
2104	460
1416	232
1534	315
852	178

Tabla 2.1: Relación precio-área

pasa la recta y θ_1 es la pendiente de la recta. si $\theta_0 = 0$ se dice que tenemos una regresión lineal con una variable, también es llamado regresión lineal univariable.

$$h_{\theta}(x) = \theta_0 + \theta_1 x \quad (2.1)$$

2.1.2. Función de costo

Lo que se busca es que nuestra hipótesis sea la mejor, esto es que la distancia que hay de cada dato de entrenamiento y la recta que está definida por la función de hipótesis sea la menor posible. Cuando minimizamos estas distancias decimos que estamos minimizando el error. La función de costo nos regresa éste error, como su nombre lo indica nos está regresando el costo, por lo tanto lo que queremos hacer es minimizar esta función. La función de costo se indica en la ecuación 2.2. En este caso estamos trabajando con una sola variable por lo que $\theta_0 = 0$ y para este caso $(h_{\theta}(x^{(i)}))$ es equivalente a $\theta_1 x^{(i)}$. Nuestro objetivo siempre será minimizar la función de costo $J(\theta_0, \theta_1)$.

$$J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 \quad (2.2)$$

Vamos ver como se comporta la función de costo en a diferentes valores de θ_1 , para esto nos ayudaremos de la gráfica que se encuentra en la figura 2.2.

Si $\theta_1 = 1$

$$J(1) = \frac{1}{2m} (1 * 1 - 1)^2 + (1 * 2 - 2)^2 + (1 * 3 - 3)^2 = 0$$

Nuestra hipótesis presenta un costo cero por lo que es una buena hipótesis y posiblemente la mejor. Si hacemos $\theta_1 = 0,5$ tenemos:

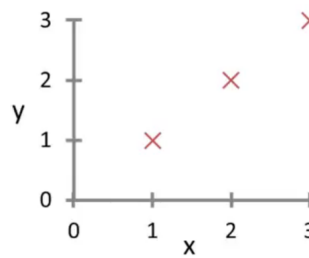


Figura 2.2: Gráfica x-y

$$J(0,5) = \frac{1}{2m} (0,5 * 1 - 1)^2 + (0,5 * 2 - 2)^2 + (0,5 * 3 - 3)^2 = \frac{3,5}{6} \approx 0,58$$

Si hacemos $\theta_1 = 0$

$$J(0) = \frac{1}{2m} (-1)^2 + (-2)^2 + (-3)^2 = \frac{14}{6}$$

Si seguimos dando valores a θ_1 y graficamos los valores de la función de costo veremos que la función de costo es una parábola donde el punto más bajo son las coordenadas (1,0).

2.2. Parámetro de aprendizaje

2.2.1. Descenso de gradiente

Como vimos anteriormente lo que buscamos es minimizar la función de costos, en esta sección veremos un algoritmo llamado el descenso de gradiente. Dicho algoritmo no sólo se utiliza en la regresión lineal sino en todo el aprendizaje automático. Con el descenso de gradiente podemos minimizar cualquier función no sólo la función de costos.

Supongamos que tenemos una función $J(\theta_0, \theta_1)$ y queremos minimizarla, lo que hacemos es darle un valor aleatorio a θ_0 y θ_1 , lo que haremos es cambiar estos valores de manera que en cada cambio que hagamos $J(\theta_0, \theta_1)$ se cada vez menor.

Supongamos que la superficie que se muestra en la figura 2.3 es la representación gráfica de una función de costos dada una función de hipótesis y aleatoriamente elegimos valores para θ_0 y θ_1 éste punto se muestra en la imagen como la primera cruz negra que está en el punto más alto. Imaginemos que tú estás parado en una colina que se representa por la función $J(\theta_0, \theta_1)$ vista en la imagen, y tu posición es el punto θ_0 y θ_1 , ahora lo que quieres es dar un paso de tal forma que vayas hacia abajo, das este paso y después vuelves a ver en qué dirección debes dar el siguiente paso para ir cada vez más abajo, estos pasos se representan en la figura con las estrellas negras. Como podemos ver después de una serie de repeticiones llegamos al punto más bajo de toda la función, los valores θ_0 y θ_1 son valores bastante aceptables para trabajar nuestra hipótesis. el algoritmo de descenso de gradiente se muestra en la ecuación 2.3 este algoritmo se tiene que repetir hasta que converga.

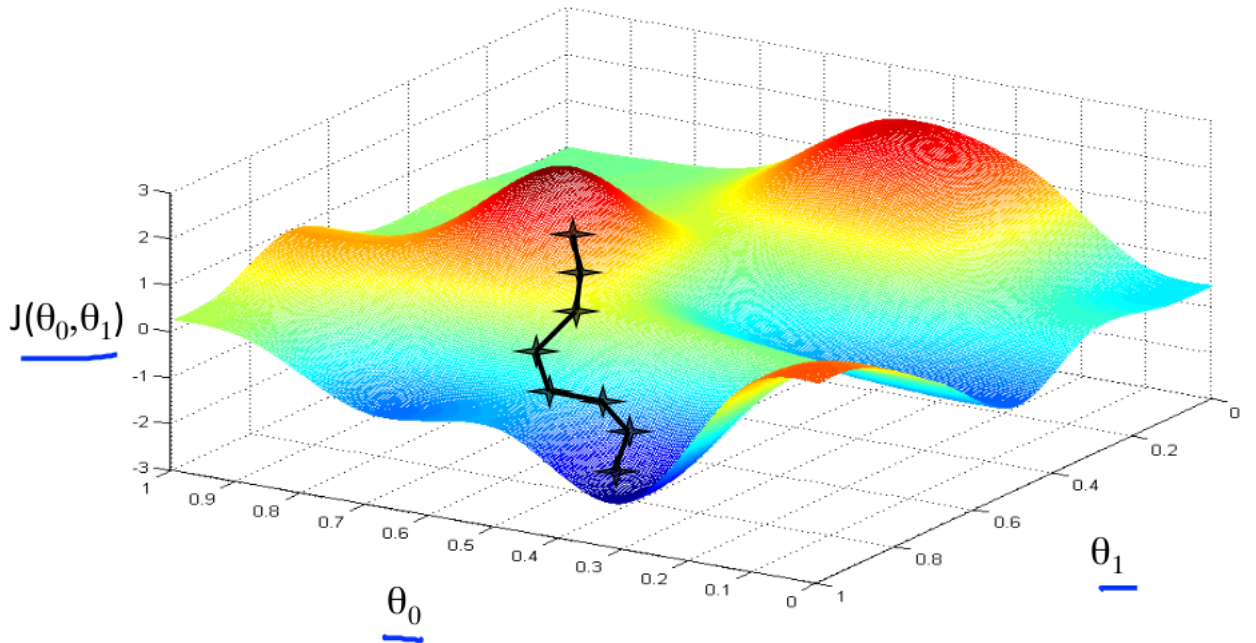


Figura 2.3: Minimización de $J(\theta_0, \theta_1)$

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1) \quad \text{Para } j = 0 \text{ y } j = 1 \quad (2.3)$$

Lo que le estamos diciendo es que con cada iteración el valor de θ_j se tiene que actualizar a un nuevo valor que tiene que ser menor al anterior.

α es el índice de aprendizaje y lo que hace es controlar qué tan grande es el paso que estamos dando con el gradiente de descenso, si α es muy grande estamos dando pasos muy grandes hacia abajo, si α es pequeño estaremos dando pasos muy pequeños. Uno de nuestros objetivos es encontrar el mejor

valor de α ya que al dar pasos muy grandes puede que oscile todo el tiempo entre valores bajos y altos entrando en un bucle infinito y puede que no converga. Si α da pasos muy pequeños tardará demasiado nuestro algoritmo en encontrar una solución aparte de consumir muchos recursos. Mas adelante veremos como encontrar el mejor valor para α .

Algo que tenemos que tomar en cuenta para este algoritmo es que tiene que haber una actualización simultanea entre los términos θ_0 y θ_1 como se muestra en las ecuaciones desde la 2.4 a 2.7.

$$temp_0 := \theta_0 - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta_0, \theta_1) \quad (2.4)$$

$$temp_1 := \theta_1 - \alpha \frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta_0, \theta_1) \quad (2.5)$$

$$\theta_0 := temp_0 \quad (2.6)$$

$$\theta_1 := temp_1 \quad (2.7)$$

Lo que vamos a hacer a continuación es usar el gradiente de descenso para minimizar la función de costo, para esto nos vamos a centrar en las derivadas parciales de dicha función.

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)})^2 = \frac{\partial}{\partial \theta_j} \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^m (\theta_0 + \theta_1 x^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (2.8)$$

A partir de la ecuación 2.8 podemos escribir las derivadas parciales tanto para θ_0 como para θ_1 como se muestra a continuación.

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)}) \quad (2.9)$$

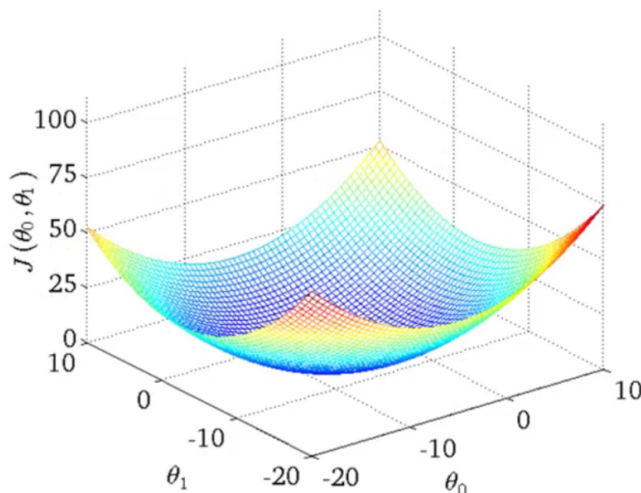
$$\frac{\partial}{\partial \theta_1} J(\theta_0, \theta_1) = \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)}) x^{(i)} \quad (2.10)$$

Ahora lo que hacemos es sustituir las ecuaciones 2.9 y 2.10 en 2.4 y 2.5 respectivamente. De igual forma tenemos que actualizar θ_0 y θ_1 hasta que convergan.

$$\theta_0 := \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)}) \quad (2.11)$$

$$\theta_1 := \theta_1 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_{\theta}(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_1^{(i)} \quad (2.12)$$

$$(2.13)$$



La función de costos para la regresión lineal siempre será convexa y en forma de arco tal y como se ve en la figura 2.4. Cuando obtenemos el mínimo de la función siempre será un mínimo global ya que es el único punto más bajo que tiene, a diferencia de la función que se muestra en la figura 2.3 que también posee mínimos locales.

Entonces si encontramos los valores θ_0 y θ_1 del punto más bajo de la función $j(\theta_0, \theta_1)$ y sustituimos dichos valores en la función de hipótesis diremos que dicha función puede predecir un valor con una exactitud aceptable.

Figura 2.4: Función de costo para una regresión lineal

Capítulo 3

Regresión lineal con múltiples variables

3.1. Múltiples características

Hasta este punto habíamos puesto como ejemplo predecir el precio de una casa dado su tamaño, que pasaría si queremos predecir el precio de una casa pero no sólo tenemos su tamaño como característica si también contamos con otras como el numero de habitaciones, pisos, años que tiene la casa de ser construida, etc. Dichas características se encuentran en la tabla 3.1.

Tamaño (<i>feet</i> ²)	Número de habitaciones	Número de pisos	Años de la casa	Precio(\$1000)
2104	5	1	45	460
1416	3	2	40	232
1534	3	2	30	315
852	2	1	36	4178
...

Tabla 3.1: Múltiples características

Ahora vamos a hablar sobre la notación que usaremos. El tamaño sera nuestra variable x_1 el número de habitaciones será x_2 y así sucesivamente, el valor del precio será nuestra variable y .

n : Número de características.

x^i : Características del i -ésimo dato de entrenamiento (Filas).

x_j^i : Valor de la característica j en el i -ésimo dato de entrenamiento.

En el ejemplo mostrado en la tabla $n = 4$ ya que tenemos 4 características, $m = 4$ ya que tenemos 4 datos de entrenamiento. El valor que corresponde a $x_3^{(2)} = 2$ y $x^{(2)}$ se representa como una matriz de 4×1 cuyos valores son 1416, 3, 2, 40.

$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} 1416 \\ 3 \\ 2 \\ 40 \end{bmatrix}$$

Al trabajar con mas características tenemos que cambiar nuestra función de hipótesis como se muestra en la ecuación 3.1.

$$h_{\theta}(x) = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n \quad (3.1)$$

En nuestro ejemplo θ_0 es el precio base de la casa, θ_1 es el precio por *feet*², θ_2 es el precio por una habitación, θ_3 es el precio por un piso y θ_4 es el precio por cada año de la casa, podemos considerar

la casa pierde su valor en función de los años por lo tanto θ_4 sería un valor negativo. x_1 es el número de *feet*² que tiene la casa, x_2 es el número de habitaciones, x_3 es el número de pisos que tiene la casa, x_4 son los años que tiene la casa. Por convención $x_0^{(i)} = 1$. Lo que haremos a continuación será vectorizar las variables x y θ como se muestra en la ecuación 3.2.

$$x = \begin{bmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1} \quad \theta = \begin{bmatrix} \theta_0 \\ \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1} \quad \theta^T = [\theta_0 \quad \theta_1 \quad \theta_2 \quad \dots \quad \theta_n] \quad (3.2)$$

Entonces tenemos que:

$$h_\theta(x) = \theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n = \theta^T x \quad (3.3)$$

Lo que tenemos que hacer es de igual forma como en el caso de una variable, actualizar los valores de θ con un algoritmo iterativo hasta que estos convergan.

$$\theta_0 := \theta_0 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_0^{(i)} \quad (3.4)$$

$$\theta_1 := \theta_1 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_1^{(i)} \quad (3.5)$$

$$\theta_2 := \theta_2 - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_2^{(i)} \quad (3.6)$$

...

Visto de otra forma nuestro algoritmo para múltiples variables queda resumido en la ecuación 3.7

$$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{1}{m} \sum_{i=0}^m (h_\theta(x^{(i)}) - y^{(i)}) x_j^{(i)} \quad \text{Para } j := 0 \dots n \quad (3.7)$$

3.2. Escalamiento de características

Al trabajar con múltiples características tenemos que tomar en cuenta el rango de valores que estas toman, por ejemplo tenemos una característica que es el tamaño de la casa cuyos valores oscilan entre 0-2000 y tenemos otra característica que es el número de habitaciones cuyos valores oscilan entre 1-5.

Al ejecutar el gradiente de descenso puede oscilar dando pasos muy grandes o muy pequeños, este comportamiento se sale de nuestro control y puede que el valor nunca converga.

Lo que hacemos para evitar esto es escalar los valores de nuestras características, es decir que todas tomen un rango similar idealmente entre $-1 \leq x_i \leq 1$ es aceptable un rango un poco más grande o más pequeño.

Por ejemplo que los rangos de valores de nuestras características se encuentren en $0 \leq x_1 \leq 3$ o $-2 \leq x_2 \leq 0,5$, lo que no está permitido es tomar rangos muy grandes o muy pequeños como $-100 \leq x_3 \leq 100$ o $-0,0001 \leq x_4 \leq 0,0001$.

La ecuación que usaremos para hacer este escalamiento se muestra en la ecuación 3.8.

$$x_i := \frac{x_i - \mu_i}{s_i} \quad (3.8)$$

Donde:

x_i es la característica que queremos escalar.

μ_i es el promedio de los valores de dicha característica.

s_i Es el rango de valores (Valor maximo - Valor mínimo).

Por ejemplo si queremos escalar la característica de número de habitaciones haríamos lo siguiente.

$$x_2 = \frac{\#Habitaciones - 2}{5}$$

3.3. Índice de aprendizaje

Ahora vamos a hablar del parámetro de aprendizaje α . Como ya habíamos dicho, uno de nuestros objetivos principales es minimizar la función $J(\theta)$ por lo que a cada iteración ésta debe ser menor, si la graficamos en el eje Y y el número de iteraciones en el eje X, debemos de observar una gráfica en la que si $x \rightarrow \infty$, $y \rightarrow 0$. Decimos que $J(\theta)$ converge si decrece menos de 10^{-3} en cada iteración.

Si al graficar $J(\theta)$ en el eje Y y el número de iteraciones en el eje X y vemos una curva que conforme $x \rightarrow \infty$, $y \rightarrow \infty$ vemos que no converge, en este caso tenemos que hacer uso de una α más pequeña. El número de iteraciones necesarias para que nuestra función converga es variable, para una aplicación nos puede tomar 30 iteraciones mientras que para otra distinta nos puede tomar 30,000 y para otra aplicación 30,000,000.

Es muy difícil saber de antemano cuantas iteraciones necesitará nuestro algoritmo, podemos dar con un aproximado trazando las gráficas de $J(\theta)$ - Iteraciones y $J(\theta)$ - θ . Otra cosa que hay que tener en cuenta es que para un valor de α lo suficientemente pequeño, $J(\theta)$ debe decrecer en cada iteración, pero si α es muy pequeña, el gradiente de descenso puede converger de una forma mucho más lenta.

Resumiendo:

Si α es muy pequeño converge muy lento.

Si α es muy grande $J(\theta)$ puede no decrecer con cada iteración y posiblemente no converger.

Para escoger valores de α podemos elegir entre 0.001, 0.01, 0.1, 1.

3.4. Características y regresión polinomial

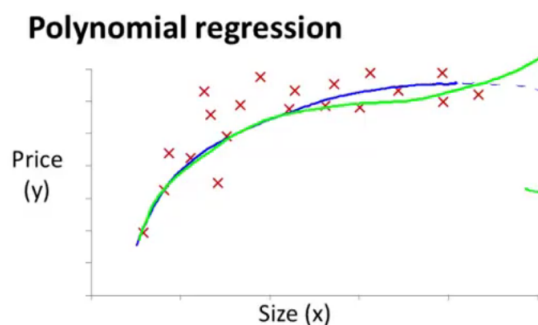


Figura 3.1: Regresión polinomial

En ocasiones tenemos datos que al graficarlos no parece que una línea recta se ajuste de la mejor manera sino que tenemos que hacer uso de una función polinomial.

Veamos el ejemplo de una casa, al graficar el precio y el tamaño vemos que no parece una línea recta, si usamos un polinomio de la forma $\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2$ vemos como se muestra con la línea azul en la figura 3.1 que se ajusta un poco mejor en cierto rango de valores, sin embargo este polinomio de grado dos tiende a decender con forme el eje x tiende a ser mayor, y no tiene sentido que una casa a mayor tamaño cueste menos.

Veamos con un polinomio de grado 3 $\theta_0 + \theta_1 x + \theta_2 x^2 + \theta_3 x^3$ vemos que se parece en cierta forma a nuestro polinomio de grado 2, sin embargo cuando éste descende, el de grado 3 incrementa como lo muestra la línea verde en la figura 3.1, tiene más sentido que una casa a mayor tamaño el precio sea mayor. Ahora cómo hacemos para ajustar el modelo cúbico que tiene tres características a nuestro problema de las casas que en este caso sólo tenemos la característica del tamaño y con base en ello obtenemos el precio. Lo que podemos hacer es tomar el tamaño y reemplazarlo por la variable x como vemos en la ecuación 3.9. También podemos combinar nuestras características con el fin de mejorar nuestra hipótesis, por ejemplo, si

tengo dos características (Largo y Ancho de mi casa), las puedo combinar haciendo una sola (Área de mi casa = LargoXAncho).

$$\begin{aligned}
h_{\theta}(x) &= \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 \theta_3 x_3 \\
h_{\theta}(x) &= \theta_0 + \theta_1(\text{tamaño}) + \theta_2(\text{tamaño})^2 \theta_3(\text{tamaño})^3 \\
x_1 &= (\text{tamaño}) \\
x_2 &= (\text{tamaño})^2 \\
x_3 &= (\text{tamaño})^2
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Al trabajar con regresión polinomial resulta de gran importancia el escalamiento ya que por ejemplo si el tamaño de la casa va de 1-1000, al elevarlo al cuadrado va de 1-1,000,000 y al elevarlo al cubo es de 1-10⁹.

3.5. Ecuación Normal

La ecuación normal para algunos problemas de regresión lineal nos dará una mejor manera de resolver los valores de θ para el valor óptimo. Hasta este punto el algoritmo que hemos usado para minimizar nuestra función de costo es el gradiente de descenso que involucra muchas iteraciones. En contraste la ecuación normal nos da un método para despejar θ de forma analítica, esto para evitar usar un algoritmo iterativo y calcular en un sólo paso el valor óptimo de θ . Lo que hacemos para encontrar el valor mínimo de θ es igualar la derivada de la función $J(\theta)$ a cero y encontrar los valores de θ .

Tomemos el ejemplo de las casas con múltiples características que tenemos en la tabla 3.1 lo que haremos será añadir x_0 que como vimos anteriormente $x_0^j = 1$ quedando como se muestra en la tabla 3.2.

x_0	Tamaño ($feet^2$)	Número de habitaciones	Número de pisos	Años de la casa	Precio(\$1000)
1	2104	5	1	45	460
1	1416	3	2	40	232
1	1534	3	2	30	315
1	852	2	1	36	4178

Tabla 3.2: Datos de casas

Ahora vamos a construir una matriz que contiene todos mis datos de entrenamiento, así como el vector y .

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 2104 & 5 & 1 & 45 \\ 1 & 1416 & 3 & 2 & 40 \\ 1 & 1534 & 3 & 2 & 30 \\ 1 & 852 & 2 & 1 & 36 \end{bmatrix} \quad y = \begin{bmatrix} 460 \\ 232 \\ 315 \\ 178 \end{bmatrix}$$

A partir de estos vectores podemos calcular θ como se muestra en la ecuación 3.10.

$$\theta = (X^T X)^{-1} X^T y \tag{3.10}$$

Las ventajas de usar la ecuación normal son:

- No se necesita elegir un valor para α
- No se necesita iterar.

Las ventajas del gradiente de descenso son:

- Funciona bien aunque n sea demasiado grande.

Las desventajas de la ecuación normal son:

- Se necesita calcular $(X^T X)^{-1}$
- Es muy lento si n es muy grande.

Conviene optar por la ecuación normal cuando $n < 10,000$. Cuando queremos resolver un problema por ejemplo de clasificación como regresión logística nos damos cuenta que el algoritmo de la ecuación normal no funciona por lo que tendremos que optar por el gradiente de descenso.