Regresión Lineal

Dr. Mauricio Toledo-Acosta

Diplomado Ciencia de Datos con Python

Regresión Lineal

Table of Contents

- Introducción
- 2 Regresión Lineal
- Regresión Polinomial
- 4 Regresión Lineal con Regularización
- Detalles adicionales
 - Linealidad
 - Multicolinealidad entre features



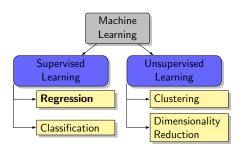
La tarea de la Regresión

Regresión

La regresión es una técnica para investigar la relación entre variables independientes y una variable dependiente o resultado. Se utiliza como método de modelaje predictivo en el Machine Learning, en el que se emplea un algoritmo para predecir resultados continuos.

Es una de las principales partes del aprendizaje supervisado.





Observa las variables independientes (features/características) y la variable dependiente (etiqueta/salida).

• Predecir el peso de una persona a partir de su altura.



Observa las variables independientes (features/características) y la variable dependiente (etiqueta/salida).

- Predecir el peso de una persona a partir de su altura.
- Predecir la altura de una persona a partir de la longitud del fémur.



Observa las variables independientes (features/características) y la variable dependiente (etiqueta/salida).

- Predecir el peso de una persona a partir de su altura.
- Predecir la altura de una persona a partir de la longitud del fémur.
- Predecir el precio de una casa a partir de su superficie de construcción, habitaciones, ubicación.

Observa las variables independientes (features/características) y la variable dependiente (etiqueta/salida).

- Predecir el peso de una persona a partir de su altura.
- Predecir la altura de una persona a partir de la longitud del fémur.
- Predecir el precio de una casa a partir de su superficie de construcción, habitaciones, ubicación.
- ...



Ejemplo de regresión

Altura	Peso
169.948447	?
173.865754	?
174.661475	?
170.597762	?

Ejemplo de regresión

Altura	Peso
169.948447	82.552060
173.865754	75.674023
174.661475	84.338528
170.597762	87.721204

Ejemplo de regresión

Altura	Peso
169.948447	82.552060
173.865754	75.674023
174.661475	84.338528
170.597762	87.721204

¿Qué otras variables independientes podrían ayudar a la tarea?



Diferentes algoritmos de regresión

- Regresión Lineal
 - Regresión Lineal Simple
 - Regresión Lineal Multiple
- Regresión Polinomial
- Regresión con regularización: Ridge, Lasso.
- Regresión Logística (Clasificación)
- Quantile Regression
- Support Vector Regression



Table of Contents

- Introducción
- 2 Regresión Lineal
- Regresión Polinomia
- 4 Regresión Lineal con Regularización
- Detalles adicionales
 - Linealidad
 - Multicolinealidad entre features

Regresión Lineal

Regresión Lineal

La regresión lineal es un tipo de modelo en el que se supone que la relación entre una variable independiente y una variable dependiente es lineal.

Existen dos tipos de Modelo de Regresión Lineal:

- Regresión lineal simple: Un modelo de regresión lineal con una variable independiente y una dependiente.
- Regresión lineal múltiple: Un modelo de regresión lineal con más de una variable independiente y una variable dependiente.

Variables

En un modelo de regresión lineal hay dos tipos de variables:

- La variable de entrada o predictora es la variable o variables que ayudan a predecir el valor de la variable de salida. Se suele denominar X.
- La variable de salida es la variable que queremos predecir. Se suele denominar y.

Variables

En un modelo de regresión lineal hay dos tipos de variables:

- La variable de entrada o predictora es la variable o variables que ayudan a predecir el valor de la variable de salida. Se suele denominar X.
- La variable de salida es la variable que queremos predecir. Se suele denominar y.

Para estimar y a partir de X usamos la ecuación (modelo)

$$y = \beta_0 + \beta_1 X$$



Variables

En un modelo de regresión lineal hay dos tipos de variables:

- La variable de entrada o predictora es la variable o variables que ayudan a predecir el valor de la variable de salida. Se suele denominar X.
- La variable de salida es la variable que queremos predecir. Se suele denominar y.

Para estimar y a partir de X usamos la ecuación (modelo)

$$y = \beta_0 + \beta_1 X$$

Math Disclaimer...



Queremos ajustar una línea $y = \beta_0 + \beta_1 x$ a los datos

$$x_1$$
 y_1
 x_2 y_2
 \dots \dots
 x_N y_N

https://www.geogebra.org/m/maeexqmr



Queremos ajustar una línea $y = \beta_0 + \beta_1 x$ a los datos

$$x_1$$
 y_1
 x_2 y_2
 \dots \dots
 x_N y_N

 β_0 se llama (intercepto) y β_1 es la pendiente (se llama coeficiente).

https://www.geogebra.org/m/maeexqmr

Queremos ajustar una línea $y = \beta_0 + \beta_1 x$ a los datos

$$x_1$$
 y_1
 x_2 y_2
 \dots \dots
 x_N y_N

 β_0 se llama (intercepto) y β_1 es la pendiente (se llama coeficiente).

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 \dots y_N = \beta_0 + \beta_1 x_N$$

https://www.geogebra.org/m/maeexqmr



Queremos ajustar una línea $y = \beta_0 + \beta_1 x$ a los datos

$$x_1$$
 y_1
 x_2 y_2
 \dots \dots
 x_N y_N

 β_0 se llama (intercepto) y β_1 es la pendiente (se llama coeficiente).

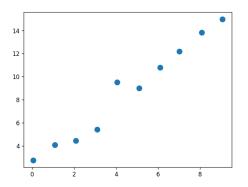
$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 \dots y_N = \beta_0 + \beta_1 x_N$$

Si tuvieramos dos puntos, la solución se calcula fácil. Si tenemos más de dos puntos, escogemos la *mejor* línea.

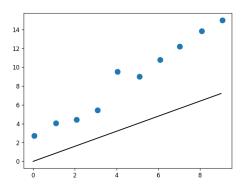
https://www.geogebra.org/m/maeexqmr



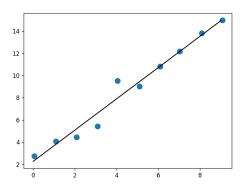
Regresión Lineal May 9, 2025



https://www.geogebra.org/m/maeexqmr



https://www.geogebra.org/m/maeexqmr



https://www.geogebra.org/m/maeexqmr

Medimos cada residuo

$$e_1 = y_1 - (\beta_0 + \beta_1 x_1)$$
...
$$e_N = y_N - (\beta_0 + \beta_1 x_N)$$



Medimos cada residuo

$$e_1 = |y_1 - (\beta_0 + \beta_1 x_1)|$$

...
 $e_N = |y_N - (\beta_0 + \beta_1 x_N)|$

Medimos cada residuo

$$e_1 = (y_1 - (\beta_0 + \beta_1 x_1))^2$$

...
 $e_N = (y_N - (\beta_0 + \beta_1 x_N))^2$



Medimos cada residuo

$$e_1 = (y_1 - (\beta_0 + \beta_1 x_1))^2$$
...
 $e_N = (y_N - (\beta_0 + \beta_1 x_N))^2$

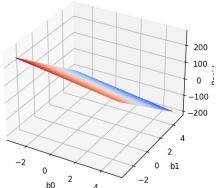
Consideramos la función que suma todos los residuos

$$\mathcal{E}(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$$



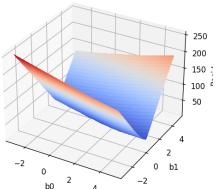
Considerando la función

$$\mathcal{E}(\beta_0,\beta_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))$$



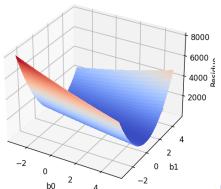
Considerando la función

$$\mathcal{E}(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{N} |y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)|$$



Considerando la función

$$\mathcal{E}(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$$

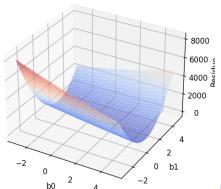




Regresión Lineal

Considerando la función

$$\mathcal{E}(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2$$





Regresión Lineal

La solución: Formulación vectorial

Considerando los residuos tenemos

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_1 + e_1$$

 $y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_2 + e_2$
...
 $y_N = \beta_0 + \beta_1 x_N + e_N$

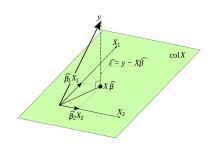
Lo podemos reescribir como

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \dots & \dots \\ 1 & x_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_N \end{pmatrix}$$

$$y = X\beta + e$$



La solución: Formulación vectorial



$$\mathbf{e}^{T}X = 0 \in \mathcal{M}_{1\times 2}$$
$$(\mathbf{y} - X\hat{\beta})^{T}X = 0$$
$$X^{T}(\mathbf{y} - X\hat{\beta}) = 0$$
$$X^{T}\mathbf{y} - X^{T}X\hat{\beta} = 0$$
$$X^{T}\mathbf{y} = X^{T}X\hat{\beta}$$
$$(X^{T}X)^{-1}X^{T}\mathbf{y} = \hat{\beta}$$
$$\hat{\beta} = (X^{T}X)^{-1}X^{T}\mathbf{y}$$

https://www.geogebra.org/m/g7uxxvkt

Regresión Lineal Multiple

En el caso general, tenemos m variables independientes (features) $x^1, ..., x^m$.

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1^1 & \dots & x_1^m \\ 1 & x_2^1 & \dots & x_2^m \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_N^1 & \dots & x_N^m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \dots \\ \beta_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \dots \\ e_N \end{pmatrix}$$

$$y = X\beta + e$$

Y la solución es, otra vez,

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T \mathbf{y}$$



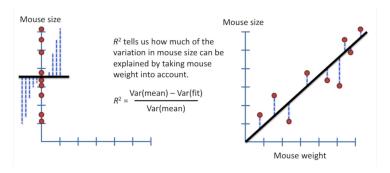
Interpretación de los coeficientes

- El signo de un coeficiente indica si existe una correlación positiva o negativa entre cada variable independiente y la variable dependiente.
- La magnitud del coeficiente indica cuánto cambia la media de la variable dependiente si se produce un cambio de una unidad en la variable independiente y se mantienen constantes las demás variables del modelo. Esto permite evaluar el efecto de cada variable de forma aislada de las demás.

Estos coeficientes son estimaciones de los *verdaderos* (los coeficientes de toda la población).

El coeficiente R^2

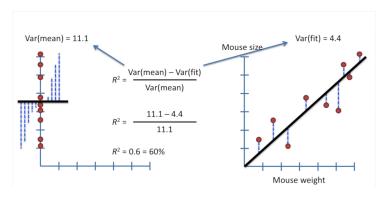
Una pregunta relevante se refiere a la incertidumbre acerca de los parámetros $\hat{\beta}$, ya que estos son variables aleatorias. El coeficiente R^2 explica la varianza de los datos que es explicada por el efecto de las variables dependientes.



https://www.youtube.com/watch?v=nk2CQITm_eo

El coeficiente R^2

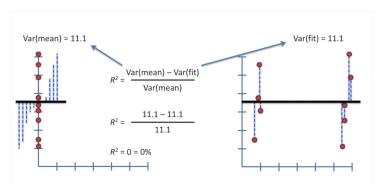
Una pregunta relevante se refiere a la incertidumbre acerca de los parámetros $\hat{\beta}$, ya que estos son variables aleatorias. El coeficiente R^2 explica la varianza de los datos que es explicada por el efecto de las variables dependientes.



https://www.youtube.com/watch?v=nk2CQITm_eo

El coeficiente R^2

Una pregunta relevante se refiere a la incertidumbre acerca de los parámetros $\hat{\beta}$, ya que estos son variables aleatorias. El coeficiente R^2 explica la varianza de los datos que es explicada por el efecto de las variables dependientes.



https://www.youtube.com/watch?v=nk2CQITm_eo

• La regresión lineal descubre la relación lineal entre varias variables predictoras y (una) varbiale dependiente. Para esto usamos OLS y obtenemos coeficientes para la regresión.

- La regresión lineal descubre la relación lineal entre varias variables predictoras y (una) varbiale dependiente. Para esto usamos OLS y obtenemos coeficientes para la regresión.
- Con estos coeficientes podemos realizar predicciones de nuevos valores.

- La regresión lineal descubre la relación lineal entre varias variables predictoras y (una) varbiale dependiente. Para esto usamos OLS y obtenemos coeficientes para la regresión.
- Con estos coeficientes podemos realizar predicciones de nuevos valores.
- Los coeficientes cuantifcan la relación de cada variable con la variable de salida.

- La regresión lineal descubre la relación lineal entre varias variables predictoras y (una) varbiale dependiente. Para esto usamos OLS y obtenemos coeficientes para la regresión.
- Con estos coeficientes podemos realizar predicciones de nuevos valores.
- Los coeficientes cuantifcan la relación de cada variable con la variable de salida.
- El coeficiente R^2 cuantifica qué tanto el modelo explica la varianza de los datos.

Table of Contents

- Introducción
- 2 Regresión Lineal
- Regresión Polinomial
- 4 Regresión Lineal con Regularización
- Detalles adicionales
 - Linealidad
 - Multicolinealidad entre features

En la regresión lineal queremos ajustar un módelo

$$y = \beta_0 + \beta_1 x$$

a los datos

$$x_1$$
 y_1
 x_2 y_2
 \dots \dots
 x_N y_N

esto se traduce en el sistema

$$\left(\begin{array}{c} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_N \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cc} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \cdots & \cdots \\ 1 & x_N \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \beta_0 \\ \beta_1 \end{array}\right) + \left(\begin{array}{c} e_1 \\ e_2 \\ \cdots \\ e_N \end{array}\right)$$

Domesión Lineal

Ahora, queremos ajustar un polinomio de grado 2

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2,$$

Ahora, queremos ajustar un polinomio de grado 2

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2,$$

el enfoque es considerar a x^2 como una nueva variable y no tanto como el cuadrado de la primer variable.

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \cdots \\ e_N \end{pmatrix}$$

Regresión Lineal May

Ahora, queremos ajustar un polinomio de grado 2

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2,$$

el enfoque es considerar a x^2 como una nueva variable y no tanto como el cuadrado de la primer variable.

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \cdots \\ e_N \end{pmatrix}$$

Sigue siendo un problema lineal en los coeficientes β_j .



Ahora, queremos ajustar un polinomio de grado 2

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2,$$

el enfoque es considerar a x^2 como una nueva variable y no tanto como el cuadrado de la primer variable.

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_N & x_N^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ \cdots \\ e_N \end{pmatrix}$$

Sigue siendo un problema lineal en los coeficientes β_j . Es necesario, entonces, generar la nueva columna de datos x_j^2 antes de realizar la regresión lineal.

4 U P 4 B P 4 E P 4 E P 9 V 4

Regresión Polinomial Multiple

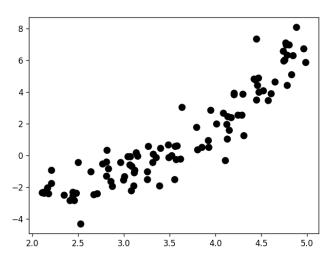
Si tenemos varias variables independientes

$$\begin{array}{c|cccc}
x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & y_1 \\
x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & y_2 \\
& \ddots & \ddots & \ddots \\
x_N^{(1)} & x_N^{(2)} & y_N
\end{array}$$

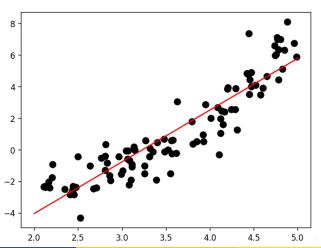
Es necesario generar nuevas columnas para incluir los datos de grado 2:

Regresión Lineal

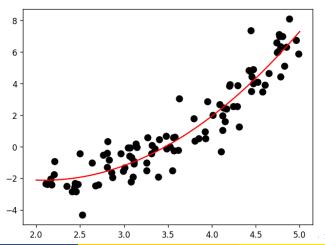
Los datos



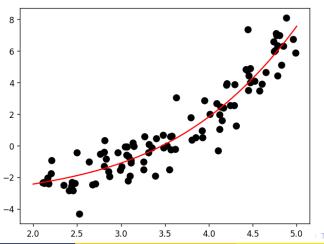
Regresión lineal



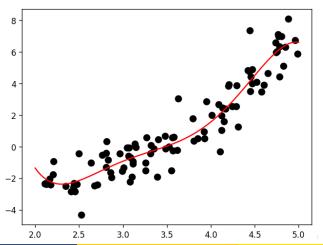
Regresión lineal con un polinomio de grado 2

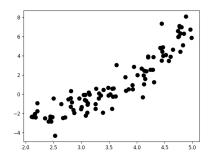


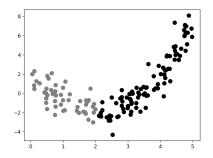
Regresión lineal con un polinomio de grado 3

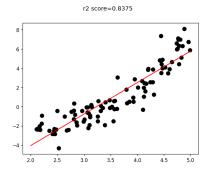


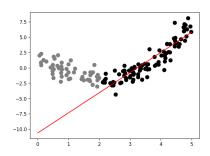
Regresión lineal con un polinomio de grado 5

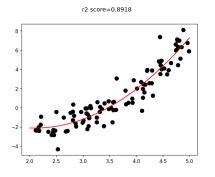


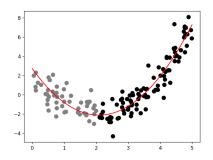


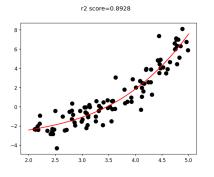


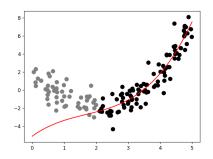


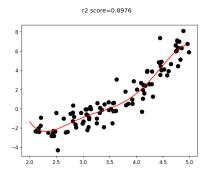


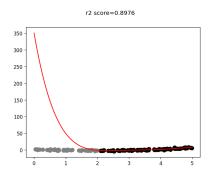












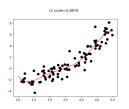
Overfitting

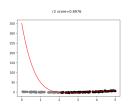
No es bueno usar un módelo más sencillo o más complejo de lo necesario ya que no son capaces de generalizar nuevos datos.

Overfitting

No es bueno usar un módelo más sencillo o más complejo de lo necesario ya que no son capaces de generalizar nuevos datos.

Al fenómeno de tener un rendimiento muy bueno en los datos de entrenamiento y un rendimiento considerablemente peor en los datos nuevos de prueba se le llama overfitting.





Overfitting vs Underfitting

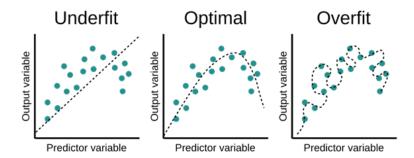


Table of Contents

- Introducción
- 2 Regresión Lineal
- Regresión Polinomial
- 4 Regresión Lineal con Regularización
- Detalles adicionales
 - Linealidad
 - Multicolinealidad entre features

Regularización en Regresión Lineal

Regresión con Regularización

Técnica utilizada en regresión lineal para evitar el sobreajuste (*over-fitting*), controlando la complejidad del modelo mediante la penalización de los coeficientes.

En lugar de minimizar únicamente la suma de cuadrados residuales:

$$\min_{w} \|Xw - y\|^2$$

se minimiza una versión penalizada:

$$\min_{w} \|Xw - y\|^2 + \alpha \|w\|^p$$

- $\alpha > 0$ es el parámetro de regularización (complejidad).
- $||w||^p$ es la norma usada para penalizar los coeficientes.

Regresión Lineal May 9, 2025 30 / 40

Ridge Regression

La regresión Ridge usa la norma L2 para penalizar los coeficientes:

$$\min_{w} \|Xw - y\|^2 + \alpha \|w\|_2^2$$

donde:

$$||w||_2^2 = \sum w_i^2$$

- $\alpha > 0$ es el parámetro de regularización (complejidad).
- Reduce la varianza del modelo.
- Trata con colinealidad entre variables.
- Contrae los coeficientes a cero, sin llegar a hacerlos cero.

Documentación Ridge

Lasso Regression

La regularización Lasso (Least Absolute Shrinkage and Selection Operator) utiliza la norma L1:

$$\min_{w} \|Xw - y\|^2 + \alpha \|w\|_1$$

donde:

$$||w||_1 = \sum |w_i|$$

- $\alpha > 0$ es el parámetro de regularización (complejidad).
- Algunos coeficientes son exactamente cero, lo que implica selección de variables.
- Genera modelos más interpretables al anular algunos coeficientes.

Documentación Lasso

ElasticNet

La regularización EslasticNet combina las penalizaciones L1 y L2:

$$\min_{w} \|Xw - y\|^2 + \alpha \rho \|w\|_1 + \frac{\alpha(1-\rho)}{2} \|w\|_2^2$$

- $\alpha > 0$: fuerza total de la penalización.
- $\rho \in [0,1]$: mezcla entre L1 y L2. Por ejemplo, si $\rho = 1$ es sólo Lasso y si $\rho = 0$ es solamente Ridge.
- Es buena para conjuntos con muchas características correlacionadas.
- Combina sparsity (como Lasso) y estabilidad (como Ridge).

Documentación ElasticNet

Table of Contents

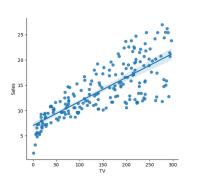
- Introducción
- Regresión Lineal
- Regresión Polinomial
- 4 Regresión Lineal con Regularización
- Detalles adicionales
 - Linealidad
 - Multicolinealidad entre features

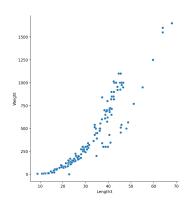
Linealidad: Bueno vs. Malo

- Linealidad entre variables predictoras y el target ¡Es bueno!
 - Existe una relación aproximadamente lineal entre cada predictora y la variable objetivo.
 - Los modelos lineales se benefician directamente (Ridge, Lasso, etc.).
 - Permite obtener coeficientes interpretables.
- Linealidad entre variables predictoras (Multicolinealidad) ¡Es malo!
 - Las variables predictoras están muy correlacionadas entre sí.
 - Genera inestabilidad en los coeficientes del modelo.
 - Dificulta la interpretación: no se sabe la contribución individual de cada variable.

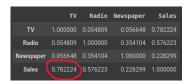
Ambos fenomenos los podemos observar mediante los coeficientes de correlación.

Ejemplos de relación lineal clara:



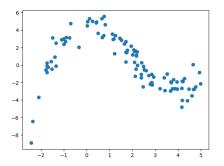


Ejemplos de relación lineal clara:



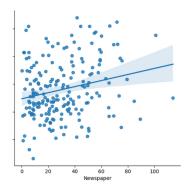


Cuidado con la correlación como herramienta para cuantificar una relación *lineal* entre las variables independientes y dependientes.





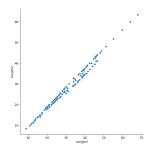
Ejemplo de **no** relación lineal:





Multicolinealidad entre features: Malo

- La multicolinealidad ocurre cuando hay relaciones lineales (o casi lineales) entre variables predictivas.
- Esto lleva a que la matriz X^TX no se pueda invertir o sea inestable.



Ejemplo: Si estás entrenando un modelo para predecir el precio de una casa, y usas las siguientes variables predictoras: Área en metros cuadrados, número de habitaciones y área en pies cuadrados.

Un caso donde ocurre la multicolinealidad

Al generar features con la codificación *one-hot* se pueden generar features colineales. Por ejemplo, si tenemos la variable gender, que puede tener dos valores (female y male)

gender	
F	
М	
F	

female	male	
1	0	
0	1	
0	1	

	female	
Ī	1	
	0	
	0	

Las variables female y male son colineales ya que

$$female = 1 - male$$