Regresión Lineal Regresión Lineal Simple Hipótesis de la Regresión Lineal Los problemas de regresión son aquellos que, dado una variable de comportamiento (x) podemos predecir el resultado de una segunda (y). La regresión Lineal símple se traduce en un sistema lineal donde la hipótesis es: $$$Hypotesis: h_0(x) = \theta_0 + \theta_1 \cdot x$$$ donde: \$h_0(x):\$ Es la predicción, es decir la variable y. • \$\theta_0\ y\ \theta_1:\$ Son los parámetros que el algoritmo trata de encontrar tales que el error de la predicción sea lo mínimo posible. Función de coste El proceso del algorítmo es, se inicializan los parámetros \$\theta_0\ y\ \theta_1\$ de manera aleatoria. Por ejemplo: \$Parametros = [0, 0]\$\$ El algoritmo procederá a hacer la primera predicción. Para cada valor de la variable \$x\$, se predice una variable \$y\$, para diferenciar, llemaremos a esta variable \$y\$ como \$y_{pred}\$. Una vez se tienen todas las predicciones se procede en calcular el costo. La fórmula para calcularlo es la siguiente: $\sl = 1^{2m} \sum_{i=1}^{m}(h_0(x^i) - y^i)^2$ donde: • \$m\$: Es el número de muestras que se estan analizando, o el número de ejemplos. • $h 0(x^i)$: Es el resultado de la predicción calculada anteriormente, es decir, el valor de la variable $y \{pred\}$. El objetivo final del algoritmo es minimizar \$J(\theta 0,\ \theta 1)\$ es decir, encontrar los \$\theta 0\ y\ \theta 1\$ óptimos que minimicen el costo o también llamado pérdida. Hasta este momento podemos resumir que tenemos: • Hipótesis: $h_0(x) = \theta_0 + \theta_1 \cdot x$. Parámetros: \$\theta_0,\ \theta_1\$ • Función de costo: $J(\theta_0) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m}(h_0(x^i) - y^i)^2$ Objetivo: \$min\ J(\theta_0,\ \theta_1)\$ Descenso del Gradiente El descenso del gradiente es un algoritmo de optimización que nos ayuda a encontrar el costo mínimo de un problema de regresión. Para encontrar el mínimo en una ecuación se usa el cálculo multivariable, se aplica las derivadas parciales a la función de coste, respecto a cada parámetro \$\theta_0\ y\ \theta_1\$. A su vez, se establece una tasa de aprendizaje que ayuda a estar re calculando los parámetros hasta que este converja a un mínimo. En este sentido el algoritmo se expresa de la siguiente manera. Repetir hasta converger { $\$\theta_j := \theta_j - \alpha \frac{\rho_j} {\beta_j} J(\theta_j) $$ $j = 1 \ y \ j = 0)$ \$\$ } donde: \$\alpha\$ es la tasa de aprendizaje. Derivadas parciales para \$\theta_0\ y\ \theta_1\$ $$$j = 0\ :\ \frac{\pi}{\pi} \simeq \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m}(h_0(x^i) - y^i)$$$j = 1\ :\ \frac{1}{m} \simeq \frac{1}{m}$ ${\hat x_i} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (h_0(x^i) - y^i) \cdot x^i$ Dadas estas derivadas, el algoritmo queda de la siguiente manera: Repetir hasta converger { $\$\text{theta_0} := \text{theta_1} - \text{theta_1} := \text{theta_0} - \text{theta_1} := \text{theta_0} - \text{theta_1} := \text{theta_0} - \text{theta_1} := \text{theta_1} := \text{theta_1} - \text{theta_2} - \text{theta_1} = \text{theta_1} - \text{theta_2} - \text{theta_1} - \text{theta_2} - \text$ $\theta_1 - \alpha_1 - \alpha_1$ Actualizar \$\theta_0\$ Actualizar \$\theta_1\$ } Implementación en código In [1]: import time IPython.display import clear_output <mark>import</mark> pandas <mark>as</mark> pd mport numpy as np import matplotlib import matplotlib.pyplot as plt matplotlib.style.use('ggplot') Uno de los dataset por excelencia para comprender el algoritmo de Regresión Lineal es el del precio de las casas de Boston. La data está disponible en el siguiente enlace. Enlace In [2]: data = pd.read_csv('../data/housing.csv', header=None, data.head 2 3 7 8 0 4 5 6 10 11 12 13 1 9 Out[2]: **0** 0.00632 18.0 2.31 0 0.538 6.575 65.2 4.0900 1 296.0 15.3 396.90 4.98 24.0 **1** 0.02731 0.0 7.07 0 0.469 6.421 78.9 4.9671 2 242.0 17.8 396.90 9.14 21.6 **2** 0.02729 0.0 7.07 0 0.469 7.185 61.1 4.9671 2 242.0 17.8 392.83 4.03 34.7 **3** 0.03237 0.0 2.18 0 0.458 6.998 45.8 6.0622 3 222.0 18.7 394.63 2.94 33.4 **4** 0.06905 0.0 2.18 0 0.458 7.147 54.2 6.0622 3 222.0 18.7 396.90 5.33 36.2 Vemos que el dataset no tiene columnas, afortunadamente Kaggle nos proporciona el nombre de las mismas para poder añadírselas. CRIM: tasa de criminalidad en la zona. ZN: proporción de suelo residencial zonificado para lotes de más de 25,000 pies cuadrados. • INDUS: proporción de acres comerciales no minoristas por ciudad. CHAS: variable ficticia del río Charles (= 1 si el tramo limita con el río; 0 en caso contrario). • NOX: concentración de óxidos nítricos (partes por 10 millones). RM: promedio de cuartos por vivienda. • EDAD: proporción de unidades ocupadas por sus propietarios construidas antes de 1940. • DIS: distancias ponderadas a cinco centros de empleo de Boston. • RAD: índice de accesibilidad a las carreteras radiales. • TAX: tasa de impuesto a la propiedad de valor total por \$ 10,000. PTRATIO: proporción de alumnos por maestro por B: 1000 * (Bk-0.63)2 donde Bk es la proporción de negros por ciudad. LSTAT: \% de la población con status inferior. MEDV: valor medio de las viviendas ocupadas por sus propietarios en miles de dólares. In [3]: columns = ['CRIM', 'ZN', 'INDUS', 'CHAS', 'NOX', 'RM', 'AGE', 'DIS', 'RAD', 'TAX', 'PTRATIO', data.columns = columns data.head CRIM ZN INDUS CHAS NOX RM AGE DIS RAD TAX PTRATIO **B LSTAT MEDV** Out[3]: **0** 0.00632 18.0 2.31 0 0.538 6.575 65.2 4.0900 1 296.0 15.3 396.90 4.98 24.0 7.07 **1** 0.02731 0.0 0 0.469 6.421 78.9 4.9671 2 242.0 17.8 396.90 9.14 21.6 2 242.0 **2** 0.02729 0.0 7.07 0 0.469 7.185 61.1 4.9671 17.8 392.83 4.03 34.7 0 0.458 6.998 45.8 6.0622 3 222.0 **3** 0.03237 0.0 2.18 18.7 394.63 2.94 33.4 **4** 0.06905 0.0 2.18 0 0.458 7.147 54.2 6.0622 3 222.0 18.7 396.90 5.33 36.2 Se procederá a predecir el precio medio de la vivienda (MEDV) respecto al número de habitaciones que la compone (RM). In [4]: # Variables necesarias para el modelo m = len(data)x = data['RM'] y = data['MEDV'] In [5]: def get_y_pred(x, theta) return theta[0] + theta[1] * x In [6]: def get_cost(y_pred, y): return (np.sum((y_pred - y).dot((y_pred - y).T))) / (2 * m) # Descenso del gradiente para encontrar los parámetros óptimos get_predictions(x, y, n_iter, theta, alpha=0.01): for i in range(n_iter): y_pred = get_y_pred(x, theta) theta_0 = theta[0] - (alpha * ((np.sum(y_pred - y)) / m)) theta_1 = theta[1] - (alpha * ((np.sum((y_pred - y) * x)) / m)) theta = [theta_0, theta_1] cost = get_cost(y_pred, y) if i % 1000 == 0: print('Predicción a la iteración {}'.format(i)) print('Costo a la iteración {}: {}'.format(i, cost)) print('Theta_0: {}, Theta_1: {}'.format(theta_0, theta_1)) .o = {} + {} * X'.format(theta 0, theta 1)) print('\n') plt.figure(figsize=(8,8)) plt.scatter(x, y, label='Datos Reales') plt.plot(x, y_pred, color='k', label='Predicción') plt.title('Num Habitaciones vs Precio') plt.xlabel('Numero de Habitaciones') plt.ylabel('Precio en Miles de Dolares') plt.legend(loc='best') plt.show() time.sleep(0.1) clear_output(wait=True) return theta initial_theta = theta = np.array([0,0]) $n_{inter} = 50001$ theta_optim = get_predictions(x, y, n_inter, initial_theta) Num Habitaciones vs Precio Datos Reales Predicción 40 Precio en Miles de Dolares 30 20 10 Numero de Habitaciones In [9]: print(theta_optim Como se puede observar, el costo se va minimizando en cada iteración, y gracias al algoritmo del descenso del gradiente podemos encontrar los valores de Theta óptimos para la predicción. Algoritmo con la librería SK-Learn No es escalable estar implementando en código el algoritmo cada vez que se necesite, para ello, podemos ayudarnos de librerías como Scikit Learn que ya lo tiene implementado y es muy eficiente. Es así como podemos, en pocas líneas de código, llegar a una solución óptima. In [10]: sklearn.linear_model LinearRegression La diferencia es que Sklearn necesita un array de 2 dimensiones para funcionar, por lo que será necesario re escalar la daata. In [11]: x = x.values.reshape(-1,1)y = y.values.reshape(-1,1) In [12]: model = LinearRegression() model.fit(x, y) Out[12]: In [13]: theta_0 = model.intercept_ theta_1 = model.coef_ theta_0, theta_1 Out[13]: Regresión Lienal Múltiple Hipótesis de la Regresión Lineal Múltiple El algoritmo de regresión lineal símple puede ser muy útil, pero en ocaciones puede quedarse corto, o para problemas un poco más complejos, pueda que no sea la mejor alternativa para realizar predicciones. El modelo de regresión lineal múltiple sigue el mismo concepto que el simple, la diferencia es que ahora agregamos más de una variable independiente \$x\$. Siguiendo este sentido, la hipótesis de este algoritmo queda de la siguiente manera: $$$Hypotesis: h O(x) = \theta 0 + \theta 1 \cdot x + \theta 2 \cdot x + \theta x$ donde: • \$h 0(x):\$ Es la predicción, es decir la variable y. • \$\theta_0, \\theta_2, \\dots, \\theta_n:\$ Son los parámetros que el algoritmo trata de encontrar tales que el error de la predicción sea lo mínimo posible. Función de coste La función de costo para este algoritmo es la misma que un modelo lineal, la diferencia es que ahora se tienen que inicializar más parámetros \$\theta\$, tales que el número de \$\theta_s\$ es igual a \$n+1\$, donde \$n\$ es el total de variables independientes. $\sl = 1^{2m} \sum_{i=1}^{m}(h_0(x^i) - y^i)^2$ El objetivo final del algoritmo es minimizar \$J(\theta_s)\$ es decir, encontrar los \$\theta_s\$ óptimos que minimicen el costo o también llamado pérdida. Descenso del Gradiente Tomamos como referencia el descenso del gradiente para el modelo lineal, la diferencia es que ahora tenemos que encontrar las parámetros, pero el proceso es el mismo. $Repetir hasta converger { $\$\theta_0 := \theta_0 - \alpha frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m}(h_0(x^i) - y^i) $$ $\$\theta_s - \alpha_0 - \alpha frac{1}{m} \le h_0(x^i) - y^i) $$$ $n := \theta_i - \alpha_i -$ Actualizar \$\theta_0\$ Actualizar \$\theta_s\$ del 1 a n } Implementación en código En este caso de estudio, y para ilustrar como se crea un algoritmo de regresión lineal múltiple, tomaremos el mismo set de datos y agregaremos una variable mas, esta es la variable LSTAT. Se procede a seleccionar las variables del conjunto de datos. In [36]: # Variables independientes x = data[['RM', 'LSTAT']] y = data['MEDV'] m = len(data) In [37]: # Agregando una columna de 1 a la variable x x = x.assign(ones=1)x = x[['ones', 'RM', 'LSTAT']].valuesOut[37]: In [38]: mpl toolkits.mplot3d In [39]: x1_range = np.arange(data['RM'].min(),data['RM'].max()) x2_range = np.arange(data['LSTAT'].min(),data['LSTAT'].max()) X1, X2 = np.meshgrid(x1_range,x2_range In [40]: pred_y_multy(x, thetas) return x.dot(thetas.T) In [41]: get_cost_multy(y_pred, y) return (1 / 2*m) * np.sum((y_pred - y) * (y_pred - y)) In [42]: get_gradient_multy(x, y, n_iter, thetas, alpha) for i in range(n_iter): y_pred = pred_y_multy(x, thetas) thetas = thetas - (alpha * ((1 / m)*(($y_pred - y$).T.dot(x))) In [43]: initial_thetas = np.array([0,0,0]) alpha = 0.001n_iter = 1000000 thetas = get_gradient_multy(x,y,n_iter, initial_thetas, alpha In [44]: thetas Out[44]: Algoritmo con Scikit-Learn En la práctica, aplicar un código desde cero resulta poco escalable, afortunadamente, existen librerias que nos ayudan a obtener resultados de forma rápida y precisa. Scikit-Learn es por excelencia una de las mejores en el ámbito del Machine Learning. Podemos implementar un modelo de regresión múltiple con solo unas pocas líneas de código. In [46]: sklearn.linear_model import LinearRegression In [47]: X = data[['RM', 'LSTAT']].values y = data['MEDV'].values.reshape(-1, 1) slr = LinearRegression() slr.fit(X, y) Out[47]: In [48]: coef = slr.coef_ intercept = slr.intercept_ print(intercept, coef) Los valores que nos da como resultado Scikit-Learn son parecidos a los que se obtuvieron con el algoritmo aplicado en código. Pero hay que destacar que, Scikit-Learn es más rápido y por ende una mejor solución. Representar visualmente datos con dos o más características analizadas resulta complicado, en el siguiente gráfico se busca resaltar como los datos son proyectados a una solución dada por el algoritmo. Pero no es la mejor manera de hacerlo. Lo importante es entender los resultados y tomar decisiones en base a los mismos. In [52]: mpl_toolkits.mplot3d import * import numpy as np x1_range = np.arange(data['RM'].min(),data['RM'].max()) x2_range = np.arange(data['LSTAT'].min(),data['LSTAT'].max()) X1, X2 = np.meshgrid(x1_range,x2_range) plano = pd.DataFrame({'RM':X1.ravel(), 'LSTAT':X2.ravel()}) pred = slr.predict(plano).reshape(X1.shape) fig = plt.figure(figsize=(10,8)) ax = fig.gca(projection='3d') ax.plot_surface(X1,X2,pred, alpha=0.4, color='b') ax.scatter3D(data[ax.view init(elev=10, azim=15) plt.show(30 20 -1020 In []: