

Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada

# Partición en Entrenamiento-Validación-Prueba y el método de Validación-Cruzada

Inteligencia Artificial y Aprendizaje Automático



Dr. Luis Eduardo Falcón Morales  
Tecnológico de Monterrey

## Partición Entrenamiento-Validación-Prueba en Aprendizaje Supervisado

Usualmente se propone una partición de los datos iniciales (universo) en tres conjuntos para la generación de un modelo de aprendizaje automático bajo el criterio de aprendizaje supervisado.

- **Datos de Entrenamiento:** para generar los parámetros del modelo en la etapa de aprendizaje (también llamado entrenamiento).
- **Datos de Validación:** para medir el desempeño parcial del modelo obtenido con los datos de entrenamiento y a partir del cual proponer ajustes a los hiperparámetros que permitan mejorar los pesos del modelo, en un proceso iterativo llamado proceso o etapa de aprendizaje.
- **Datos de Prueba:** para evaluar el desempeño final del modelo.



Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada

# Modelo de Regresión Lineal Simple

Inteligencia Artificial y Aprendizaje Automático

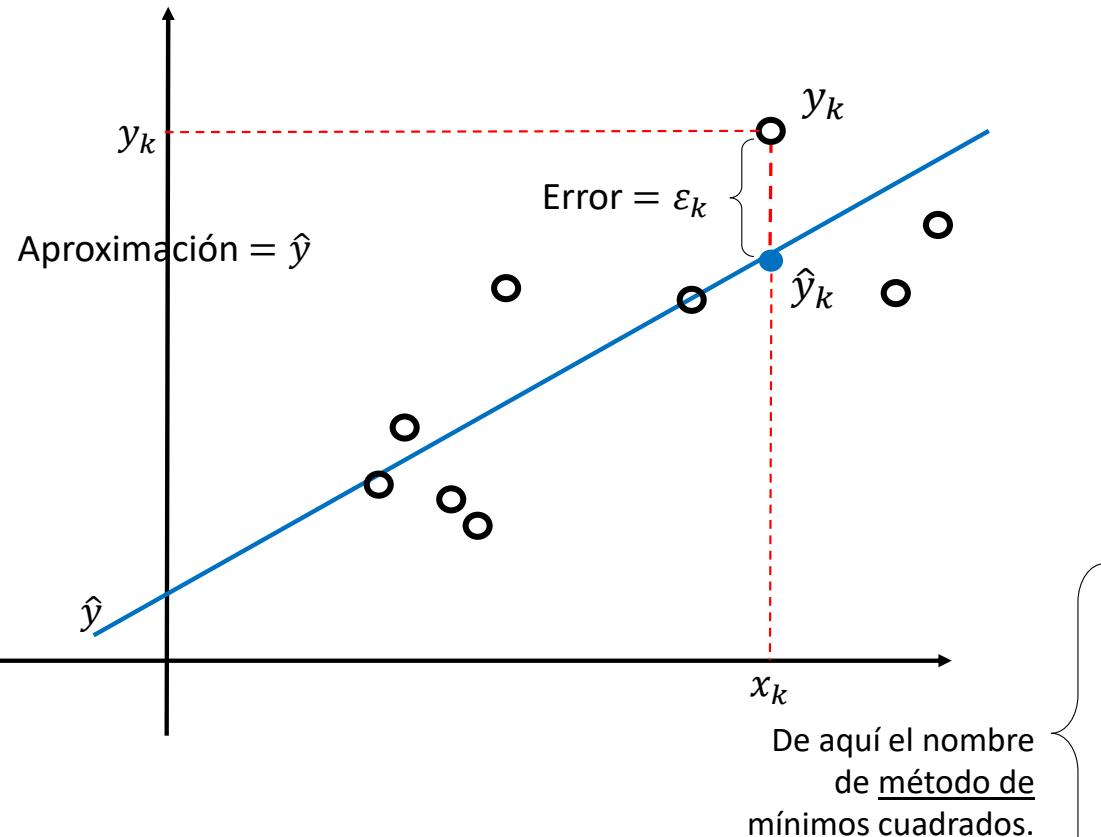


Tecnológico  
de Monterrey

Dr. Luis Eduardo Falcón Morales  
ITESM  
Campus Guadalajara

modelo propuesto:  
 $y = a + bx$

## Regresión Lineal mediante el método de mínimos cuadrados



$y_k$  : valor observado real, dado  $x_k$ .

$\hat{y}_k$  : predicción del valor observado  $y_k$ .

$$\hat{y}_k = \hat{a} + \hat{b}x_k$$

Error o Residuo de cada dato  $x_k$ :

$$\varepsilon_k = y_k - \hat{y}_k$$

$$SSE = \sum_{k=1}^n \varepsilon_k^2 = \sum_{k=1}^n (y_k - \hat{a} - \hat{b}x_k)^2$$

Así, el objetivo será encontrar los parámetros  $a$  y  $b$  de forma tal que la suma de todos estos errores sea la mínima posible.

## Función de Costo y el Problema de Optimización

El problema de encontrar las constantes  $a$  y  $b$  lo podemos ver como un problema de optimización, en particular de minimizar la función de costo  $J(a, b)$ , donde:

$$J(a, b) = \sum_{k=1}^n \varepsilon_k^2 = \sum_{k=1}^n (y_k - a - bx_k)^2$$

Es decir,

$$\min_{a,b} J(a, b) = \min_{a,b} \sum_{k=1}^n (y_k - a - bx_k)^2$$

Obtengamos ahora los valores de los parámetros  $a$  y  $b$ :

Consideremos entonces la función de costo  $J$ :

$$J(a, b) = \sum_{k=1}^n \varepsilon_k^2 = \sum_{k=1}^n (y_k - a - bx_k)^2$$

Recordemos de nuestro curso de Cálculo que para minimizar el valor de  $J$ , donde los parámetros  $a$  y  $b$  son nuestras variables a determinar, requerimos resolver el siguiente sistema de ecuaciones obtenido de las primeras derivadas parciales:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial a} = -2 \sum_{k=1}^n (y_k - a - bx_k) = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial b} = -2 \sum_{k=1}^n (y_k - a - bx_k)x_k = 0 \end{array} \right.$$

Simplificando y resolviendo el sistema de ecuaciones  $2 \times 2$  resultante, llegamos a las llamadas ecuaciones normales de mínimos cuadrados:

$$\left\{ \begin{array}{l} na + b \sum_{k=1}^n x_k = \sum_{k=1}^n y_k \\ a \sum_{k=1}^n x_k + b \sum_{k=1}^n x_k^2 = \sum_{k=1}^n x_k y_k \end{array} \right.$$

Y al resolverlas, obtenemos que el modelo óptimo de regresión lineal  $\hat{y} = \hat{a} + \hat{b}x$  dado como:

$$\hat{b} = \frac{\sum_{k=1}^n x_k y_k - n \bar{x} \bar{y}}{\sum_{k=1}^n x_k^2 - n (\bar{x})^2}$$

Pendiente

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \bar{x}$$

Ordenada en el origen

donde  $\bar{x}$  y  $\bar{y}$  son los valores promedios de  $\{x_k\}$  y  $\{y_k\}$ , respectivamente.

## Conceptos estadísticos: Varianza y Covarianza

### Varianza

Simplificando algebraicamente se puede obtener la siguiente igualdad:

$$\sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})^2 = \sum_{k=1}^n x_k^2 - n(\bar{x})^2$$

que al dividir entre  $n - 1$ , obtenemos lo que en Estadística se conoce como la varianza insesgada de la variable aleatoria  $X$ , cuyos datos muestrales están dados por el conjunto  $\{x_k\}_{k=1}^n$ , y denotado  $Var[X]$ , o bien,  $\sigma_X^2$ :

$$Var[X] = \frac{1}{n-1} \left\{ \sum_{k=1}^n x_k^2 - n(\bar{x})^2 \right\}$$

Recordemos del curso de Estadística que si  $\sigma_X^2$  es la varianza de una variable aleatoria  $X$ , entonces  $\sigma_X$  es llamada desviación estándar de  $X$ .

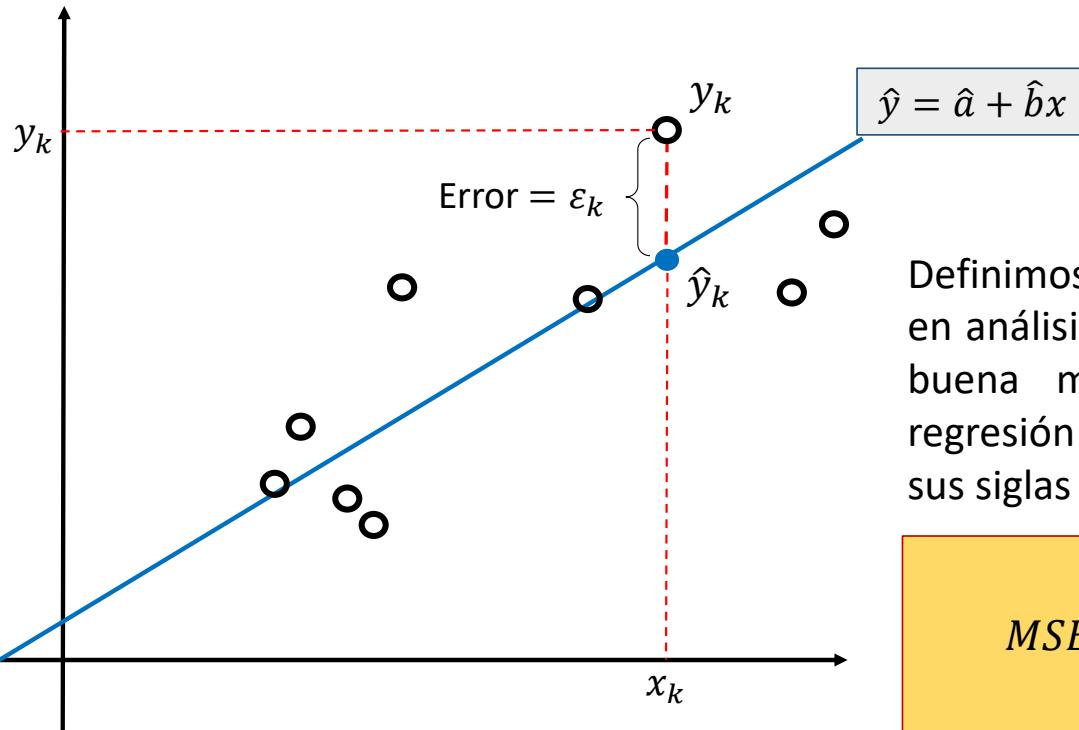
### Covarianza

Análogamente, algebraicamente se muestra que:

$$\sum_{k=1}^n (x_k - \bar{x})(y_k - \bar{y}) = \sum_{k=1}^n x_k y_k - n\bar{x}\bar{y}$$

Y nuevamente al dividir entre  $n - 1$ , obtenemos lo que en Estadística es conocido como la covarianza insesgada de las variables aleatorias  $X$  y  $Y$ , y la denotamos  $Cov[x, y]$ , o bien  $\sigma_{XY}$ :

$$Cov[x, y] = \frac{1}{n-1} \left\{ \sum_{k=1}^n x_k y_k - n\bar{x}\bar{y} \right\}$$



Error Cuadrático Medio (ECM)  
Mean Squared Error (MSE)

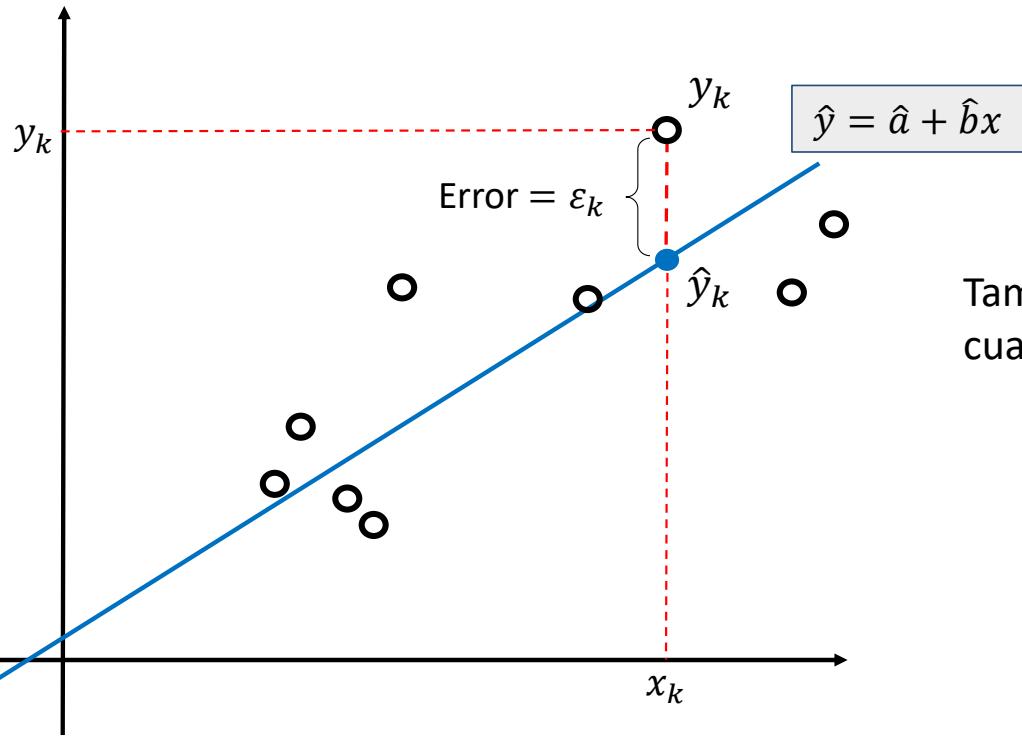
Definimos ahora un concepto ampliamente utilizado en análisis estadísticos y que por ahora nos dará una buena medida del desempeño del modelo de regresión lineal: el Error Cuadrático Medio, MSE por sus siglas en inglés:

$$MSE = \frac{SSE}{n} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \varepsilon_k^2 = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (y_k - \hat{y}_k)^2$$

Así, vemos que el *MSE* es el valor promedio de la suma del cuadrado de los residuos *SSE*.

En general, *MSE* se puede utilizar como una media de la eficiencia del modelo, así como una medida comparativa con respecto a otros modelos.

Es el equivalente a la varianza de un conjunto de datos.



Raíz del Error Cuadrático Medio  
Root Mean Squared Error (RMSE)

También se puede usar la raíz cuadrada del error cuadrático medio, es decir:

$$E_{RMSE} \equiv RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y_k - \hat{y}_k)^2}$$

La ventaja de este error es que está en las mismas unidades y escala que los datos originales.

También se puede denotar como *RMS*.

Es el equivalente de la desviación estándar de un conjunto de datos.

## Métricas para la medición de errores : modelos de Regresión

Suma del Cuadrado de los Errores

$$SSE = \sum_{k=1}^n (y_k - \hat{y}_k)^2$$

Suma de Cuadrados de la Variabilidad Total

$$S_{yy} = \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2$$

Error Cuadrático Medio

$$MSE = \frac{SSE}{n} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (y_k - \hat{y}_k)^2$$

Coefficiente de Determinación

$$R^2 = \rho^2 = 1 - \frac{SSE}{S_{yy}}$$

Raíz del Error Cuadrático Medio

$$RMSE \equiv RMS = \sqrt{MSE}$$

Coefficiente de Determinación Ajustado

$$R_{ajustado}^2 = \bar{R}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-m-1} (1 - R^2)$$

Errores o Residuos

$$\varepsilon_k = y_k - \hat{y}_k$$

Promedio de los Errores Absolutos

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n |y_k - \hat{y}_k|$$

Promedio de los Errores Porcentuales Absolutos

$$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{k=1}^n \left| \frac{y_k - \hat{y}_k}{y_k} \right|$$

$y_k$  : valores o datos reales de salida

$\hat{y}_k$  : valores pronosticados

$\bar{y}$  : valor promedio de los datos de entrenamiento (Train)

$n$  : total de datos de la muestra (Train, Val o Test)

$m$  : total de variables de entrada

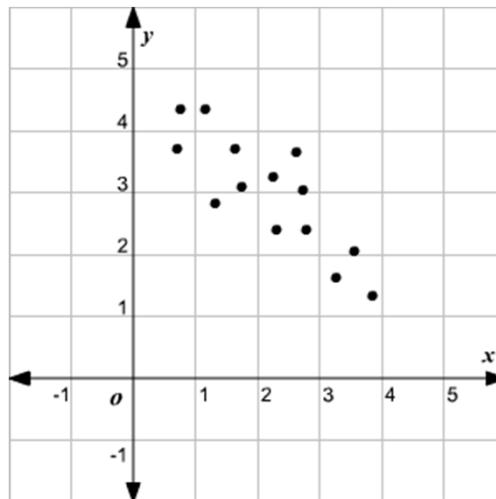
## Coeficiente de Correlación de Pearson

Ya vimos que el error cuadrático medio MSE, es una medida que nos dice qué tan bueno puede ser el modelo de regresión lineal obtenido a partir de un conjunto de datos de entrada muestrales  $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$ .

Se desea tener ahora otra medida que además nos hable sobre la relación en la cual se encuentran las variables involucradas.

Es decir se requiere una medida que nos diga qué tan bien están correlacionadas las variables aleatorias  $X$  y  $Y$ .

Existen varias formas de medir dicha correlación, siendo el coeficiente de correlación de Pearson uno de los más conocidos y utilizado.



Definimos el coeficiente de correlación de Pearson de dos variables aleatorias  $X$  y  $Y$  como:

$$\rho = \frac{\text{cov}[X, Y]}{\sqrt{\text{Var}[X] \text{Var}[Y]}} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y}$$

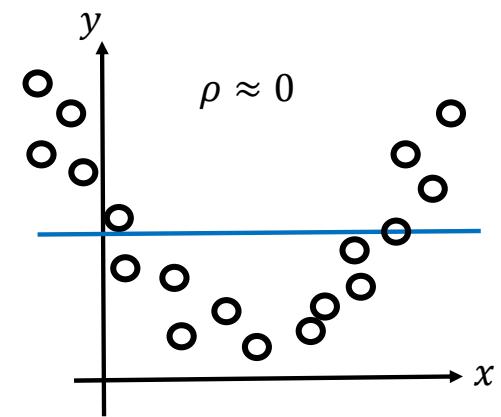
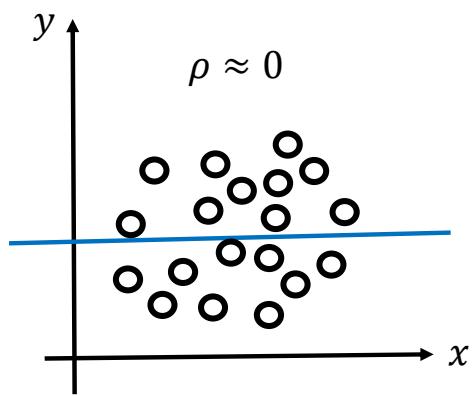
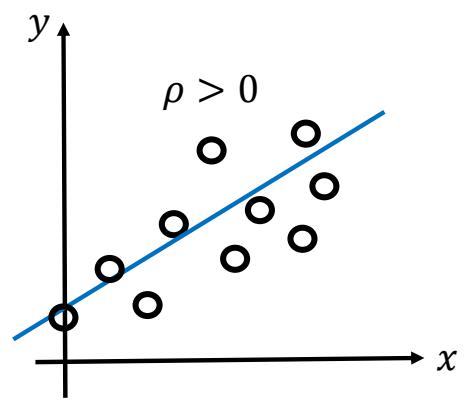
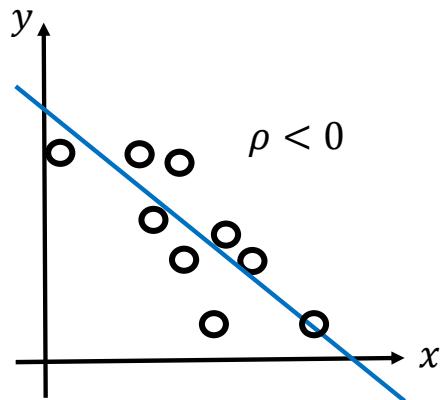
- Se tiene que  $-1 \leq \rho \leq +1$ .

Para una primera lectura del valor de  $|\rho|$ , podemos considerar los siguientes criterios:

- Correlación nula o casi nula: valores entre 0 y 0.1
- Correlación débil: valores entre 0.1 y 0.3
- Correlación moderada: valores entre 0.3 y 0.6
- Correlación fuerte (datos relacionados con estudios de personas): arriba de 0.6
- Correlación fuerte (datos relacionados con estudios de ingeniería): arriba de 0.75

Estos intervalos pueden variar dependiendo del área de estudio o investigadores.

Interpretación geométrica de la correlación de la variable dependiente  $y$  con la variable independiente  $x$ , dado un conjunto de datos bidimensionales que los aproximan  $\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^n$ .



## Coeficiente de Determinación

Aunque existen diferentes definiciones, la más común para el coeficiente de determinación es la del cuadrado del coeficiente de correlación de Pearson, y la denotamos como  $R^2$ :

$$R^2 = \rho^2 = \frac{(\text{cov}[X, Y])^2}{\text{Var}[X] \text{Var}[Y]} = 1 - \frac{\text{SSE}}{S_{yy}}$$

El coeficiente de determinación es un estadístico cuyo valor nos dice la proporción del modelo que es explicado por las variables consideradas.

Es decir, es la proporción de la variabilidad de la variable dependiente que es explicada por la variable independiente, o variables independientes para el caso del modelo multilineal que se verá más adelante.

Así, en el caso del modelo lineal simple, el coeficiente de correlación de Pearson también se puede obtener como:  $\rho = \sqrt{1 - \frac{\text{SSE}}{S_{yy}}}.$

Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada

# Modelo de Regresión Lineal Múltiple

Inteligencia Artificial y Aprendizaje Automático



Tecnológico  
de Monterrey

Dr. Luis Eduardo Falcón Morales  
ITESM  
Campus Guadalajara

## Regresión Lineal Múltiple

La hipótesis general del modelo de **regresión lineal múltiple** podemos representarla como:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_m x_m + \varepsilon$$

donde cada variable independiente  $x_k$  representa una característica del problema que trata de explicar el comportamiento de la variable/característica dependiente  $y_k$ .

La ordenada en el origen  $\beta_0$  representa el valor esperado de  $y$  cuando todas las características independientes son iguales a cero.

Además, se incluye un error o residuo  $\varepsilon$  en la hipótesis que nos recuerda que la relación en general no será perfecta.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_m x_m + \varepsilon$$

## Representación Matricial

Datos de entrenamiento:

$$y_1 = \beta_0 + \beta_1 x_{11} + \beta_2 x_{12} + \cdots + \beta_m x_{1m} + \varepsilon_1$$

$$y_2 = \beta_0 + \beta_1 x_{21} + \beta_2 x_{22} + \cdots + \beta_m x_{2m} + \varepsilon_2$$

$$\vdots \quad \vdots \quad \vdots \quad \vdots$$

$$y_n = \beta_0 + \beta_1 x_{n1} + \beta_2 x_{n2} + \cdots + \beta_m x_{nm} + \varepsilon_n$$

matricialmente

$$Y = X\beta + \varepsilon$$

donde

$$Y_{n \times 1} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

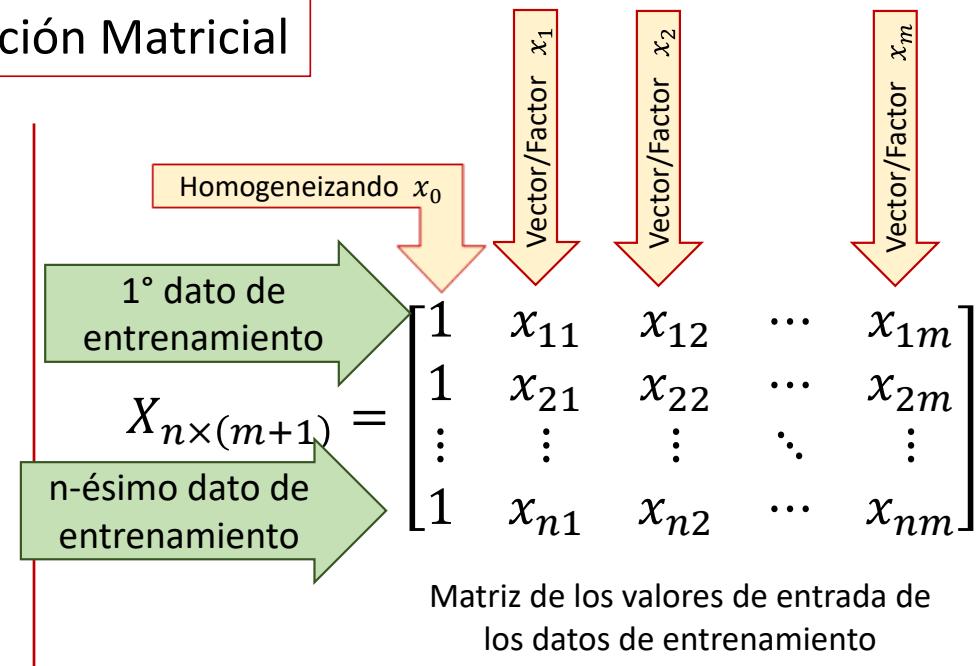
Vector de las salidas de los datos de entrenamiento

$$\beta_{(m+1) \times 1} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix}$$

Vector de los parámetros del modelo a determinar

$$\varepsilon_{n \times 1} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

Vector de los errores o residuos



## Regresión Lineal Múltiple Función de Costo / Problema de Optimización

Así, el problema de encontrar las constantes  $a$  y  $b$  nos lleva a un problema de optimización, en particular el de minimizar la función de costo  $J(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m)$  donde:

$$J(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) = \sum_{k=1}^n \varepsilon_k^2 = \sum_{k=1}^n (y_k - \beta_0 - \beta_1 x_{k1} - \beta_2 x_{k2} - \dots - \beta_m x_{km})^2 = \sum_{k=1}^n (Y_k - X_k \beta)^T (Y_k - X_k \beta)$$

Es decir,

$$\min_{\beta_k} J(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m) = \min_{\beta_k} \sum_{k=1}^n (y_k - \hat{y}_k)^2$$

donde  $y_k$  son los valores reales observados y  $\hat{y}_k$  son las predicciones del modelo:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \dots + \hat{\beta}_m x_m$$

## Modelo Lineal

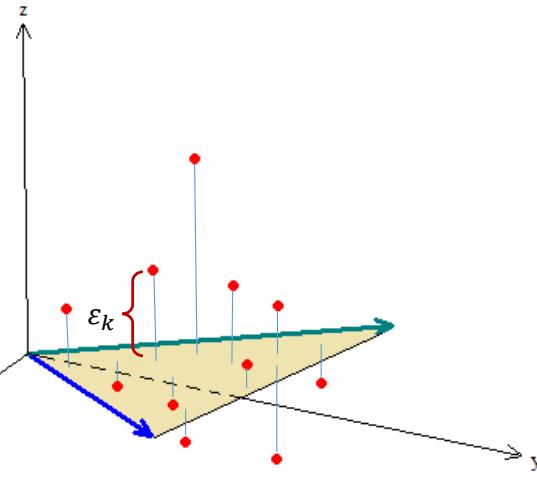


Figura: Buscar el mejor plano que aproxime los puntos de entrada dados.

Sí existe una solución analítica del problema dada por la llamada matriz pseudoinversa de Moore-Penrose.

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_m x_m$$

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

Sin embargo cuando se tiene una gran cantidad de registros y variables, la solución analítica en general no es viable debido al costo computacional y los errores numéricos involucrados en el proceso, por lo que se prefiere resolver este problema mediante métodos numéricos iterativos, como el de mínimos cuadrados.

## Regresión Lineal Múltiple mediante el método de mínimos cuadrados

En resumen, dado un conjunto de datos muestrales

$$\{(\vec{x}_k, y_k)\}_{k=1}^N$$

se desea encontrar el hiperplano que tenga el mejor ajuste en dichos datos. Donde cada  $\vec{x}_k$  es un vector de entrada de  $M$  coordenadas cuyo valor real observado es  $y_k$ .

Entonces, se desean encontrar los mejores coeficientes  $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_M$  del hiperplano de la forma:

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \hat{\beta}_2 x_2 + \dots + \hat{\beta}_M x_M$$

que mejor aproxime los datos muestrales mediante sus valores de predicción y de acuerdo a la siguiente función de costo.

## Función de Costo o Error: diferencia de cuadrados

Definimos una **función de costo** o **función error** mediante la suma de los cuadrados de las diferencias entre lo observado y lo estimado:

$$J = \sum_{k=1}^N (y_k - \hat{y}_k)^2$$

## Problema de Optimización mediante mínimos cuadrados

El objetivo es minimizar el valor de dicha función mediante el ajuste de sus coeficientes por el método de mínimos cuadrados, es decir,

$$\min_{\{\beta_k\}} \{J\} = \min_{\{\beta_k\}} \sum_{k=1}^N (y_k - \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_M x_M)^2$$

Algunos autores consideran la mitad de este valor  $J$  como la función error, o inclusive el promedio. Sin embargo, en cualquier caso las conclusiones son equivalentes.

También pueden usarse las siguientes expresiones como funciones de costo:

### Error Cuadrático Medio (Mean Squared Error-MSE)

Como una mejor medida del error, este puede promediarse para obtener el error cuadrático medio:

$$E_{MSE} \equiv MSE = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y_k - \hat{y}_k)^2$$

O bien

$$MSE = \frac{SSE}{N}$$

Este error es muy usado en diferentes tipos de pruebas y análisis estadísticos que requeriremos posteriormente.

Dicho promedio permitirá comparar errores entre muestras de diferente tamaño.

Sería el equivalente a la varianza.

### Raíz del Error Cuadrático Medio (Root Mean Squared Error-RMS)

Inclusive nos será útil también en ocasiones la raíz cuadrada del error cuadrático medio, es decir,

$$E_{RMS} \equiv RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y_k - \hat{y}_k)^2}$$

La ventaja de este error es que está en las mismas unidades y escala que los datos originales.

NOTA: También se denota como *RMSE*.

Sería el equivalente a la desviación estándar.

## Coeficiente de Determinación $R^2$ :

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{S_{yy}} = 1 - \frac{\sum_{j=1}^N (y_j - \hat{y}_j)^2}{\sum_{j=1}^N (y_j - \bar{y})^2}$$

- El coeficiente de determinación nos habla del porcentaje de variabilidad de la variable dependiente que queda explicada por el modelo a través de las variables independientes utilizadas.
- En el caso de un modelo lineal simple,  $R^2$  es equivalente al cuadrado del coeficiente de correlación de Pearson.
- Observa que  $R^2$  nos habla de qué tanto es mejor nuestro modelo de regresión usando  $\hat{y}$  como predicción, a que si usáramos simplemente el promedio  $\bar{y}$ . Es decir, a que si solo consideramos el modelo base (*baseline* en inglés) que siempre predice el valor  $\bar{y}$  para cualquier valor de entrada  $X$ .

## Coeficiente de Determinación Ajustado

En el caso de modelos de regresión lineal múltiple con  $m \geq 2$  variables linealmente independientes (las variables de entrada), el coeficiente de determinación  $R^2$  definido previamente incrementará su valor con el simple hecho de agregar más variables de independientes, aún cuando estas no aporten información para mejorar la predicción de la variable de salida. Es decir, el valor de  $R^2$  siempre aumenta al agregar más variables, aún cuando no aporten valor real al modelo.

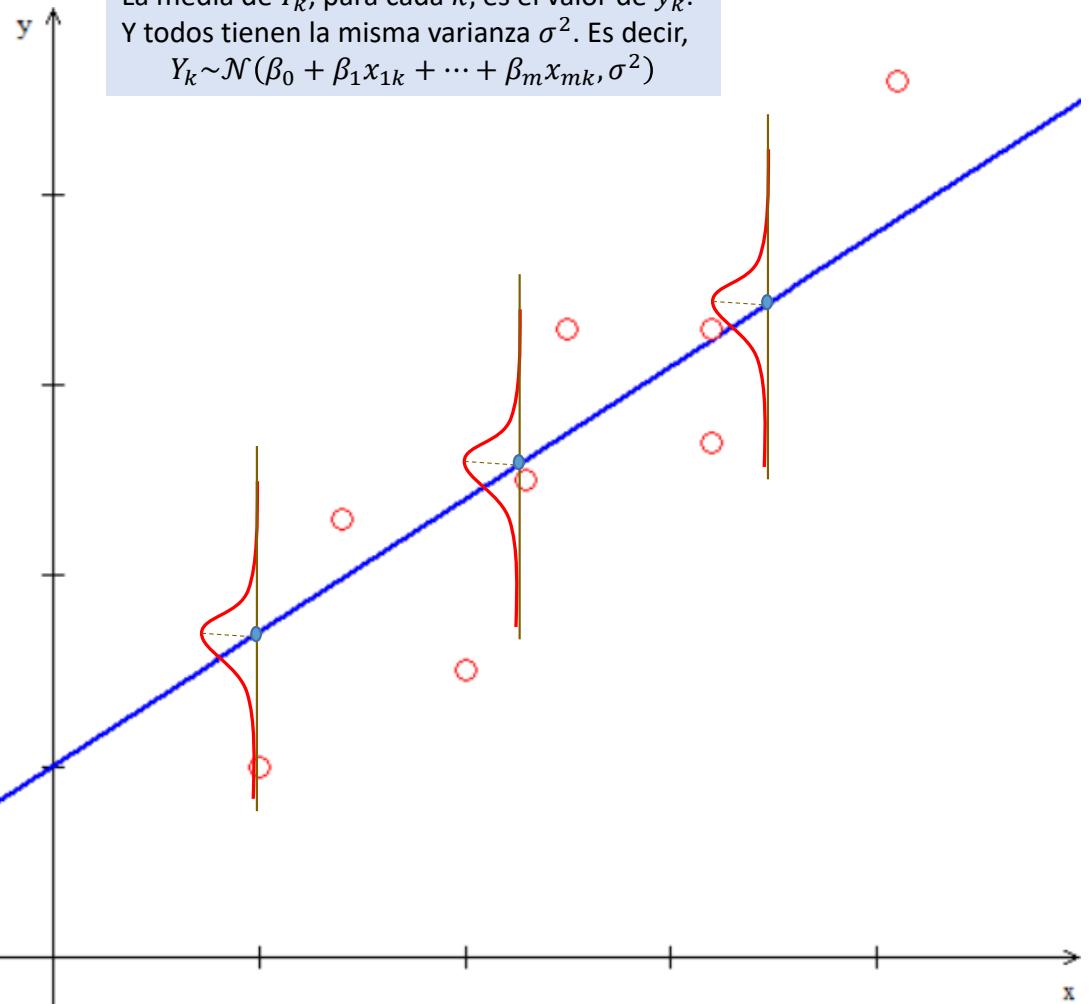
Así, para evitar sobreestimar este valor de  $R^2$ , definimos ahora el llamado **coeficiente de determinación ajustado**, denotado como  $\bar{R}^2$  y el cual definimos a continuación.

El **Coeficiente de determinación ajustado**  $\bar{R}^2$ , para una muestra de tamaño  $N$  y cuyo modelo tiene  $m$  variables independientes, se define como:

$$R_{ajustado}^2 = \bar{R}^2 = 1 - \frac{N - 1}{N - m - 1} (1 - R^2)$$

y donde  $R^2$  es el coeficiente de determinación “estándar” definido previamente.

La media de  $Y_k$ , para cada  $k$ , es el valor de  $\hat{y}_k$ . Y todos tienen la misma varianza  $\sigma^2$ . Es decir,  
 $Y_k \sim \mathcal{N}(\beta_0 + \beta_1 x_{1k} + \dots + \beta_m x_{mk}, \sigma^2)$

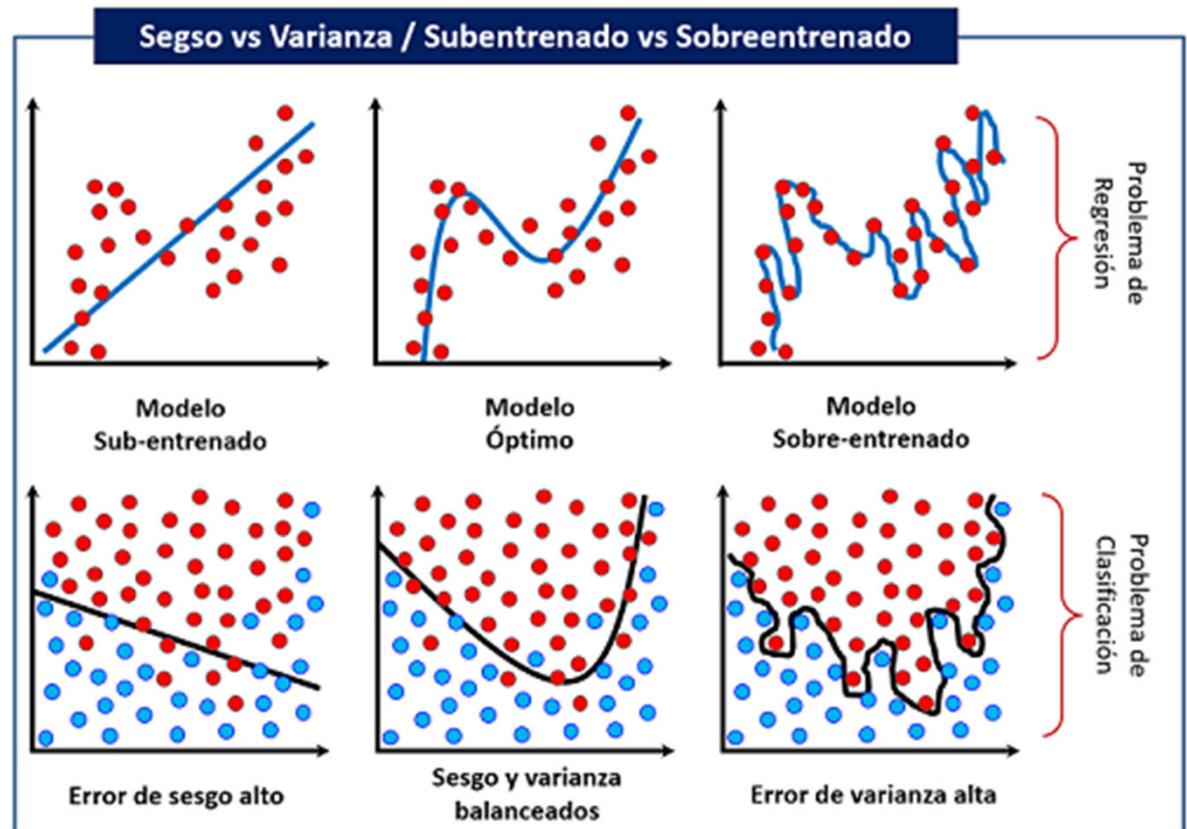


Para aplicar el modelo de regresión lineal entre dos variables aleatorias  $X$  y  $Y$ , estrictamente se deben cumplir los siguientes supuestos:

- **Linealidad:** La relación entre ambas variables debe ser lineal.
- **Normalidad:** Los valores de  $Y$  están distribuidos normalmente para cada valor de  $X$ , es decir, los residuos.
- **Homocedasticidad:** La variación alrededor de la línea de regresión tiene un mismo valor constante  $\sigma^2$  para todos los valores de  $X$ .
- **Independencia de los residuos:** Los residuos o errores  $\varepsilon = y - \hat{y}$  deben ser independientes para cada valor de  $X$ .

## Sub-entrenamiento (underfitting) vs Ajuste óptimo vs Sobre-entrenamiento (overfitting)

Recuerda que incrementar la complejidad del modelo puede ayudar a mejorar la predicción de la variable de salida y evitar el subentrenamiento, pero a su vez debemos cuidar no caer ahora en un modelo sobreentrenado.



## Modelos no-lineales en las variables de entrada: Polinomial

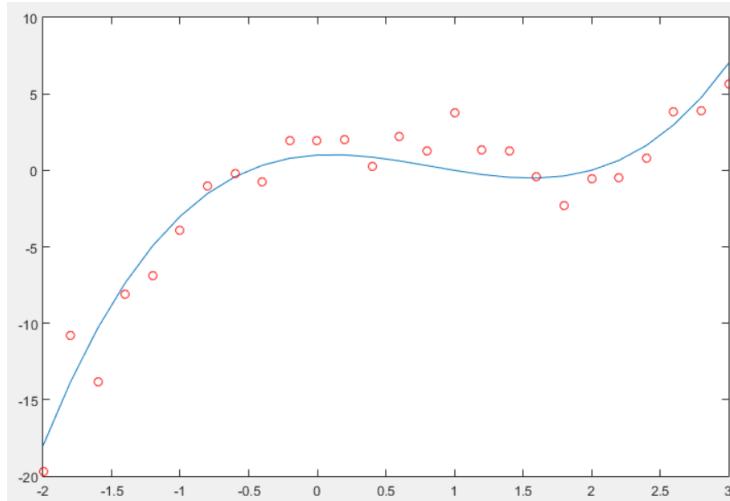
Supongamos que tenemos un conjunto de datos muestrales de entrada de dos dimensiones:

$$\{(x_k, y_k)\}_{k=1}^N$$

Para ejemplificar, los mostramos como círculos rojos en la imagen que se ilustra.

Supongamos además que teóricamente estos datos muestrales tienen un comportamiento polinomial de grado  $m$ , es decir:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_m x^m$$



Nuestro objetivo está en la siguiente dirección:

### Objetivo:

Dado un nuevo valor de entrada no conocido  $\hat{x}$ , se desea pronosticar el valor de su imagen  $\hat{y}$ .

O bien, se desea determinar la función polinomial de grado  $m$  que mejor ajusta los datos muestrales.

Podemos generar modelos polinomiales agregando la relación no lineal entre columnas deseadas:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ 1 & x_{21} & x_{22} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{bmatrix} \quad \xrightarrow{\hspace{1cm}} \quad \text{Modelo lineal:} \\ y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}^2 \end{bmatrix} \quad \xrightarrow{\hspace{1cm}} \quad \text{Modelo cuadrático en las variables de entrada:} \\ y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2$$

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & x_{11}^2 & x_{11}^3 \\ 1 & x_{21} & x_{22} & x_{21}^2 & x_{21}^3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & x_{n1}^2 & x_{n1}^3 \end{bmatrix} \quad \xrightarrow{\hspace{1cm}} \quad \text{Modelo cúbico en las variables de entrada:} \\ y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 + \beta_4 x_1^3$$

Maestría en Inteligencia Artificial Aplicada

## Método del Gradiente Descendente

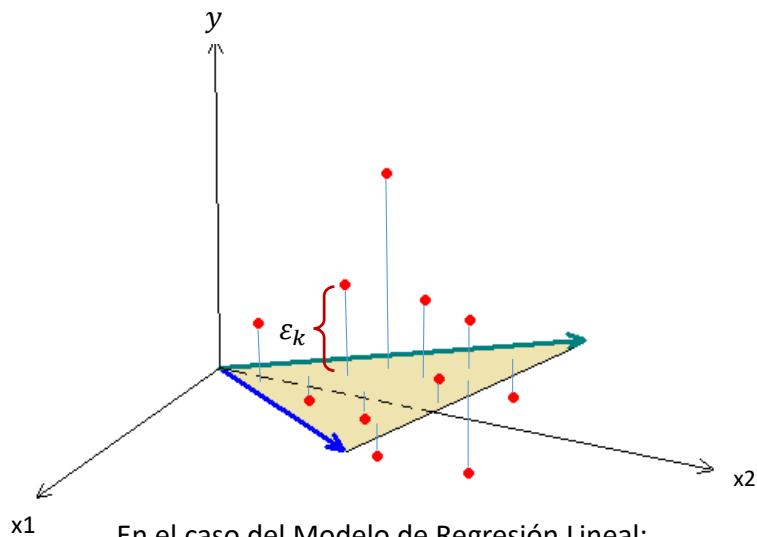
Inteligencia Artificial y Aprendizaje Automático

Dr. Luis Eduardo Falcón Morales  
Tecnológico de Monterrey



## Método de Optimización mediante una Función de Costo

Gráfico de la variable de salida  $y$  en términos de las variables de entrada  $X$ .



En el caso del Modelo de Regresión Lineal:  
Se desea encontrar el mejor hiperplano que aproxime los puntos dados.

Dado el conjunto de **datos de entrenamiento**:

$$\{(x_{k1}, x_{k2}, \dots, x_{km}, y_k)\}_{k=1}^N$$

deseamos encontrar los parámetros  $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m)$  del modelo (hiperplano):

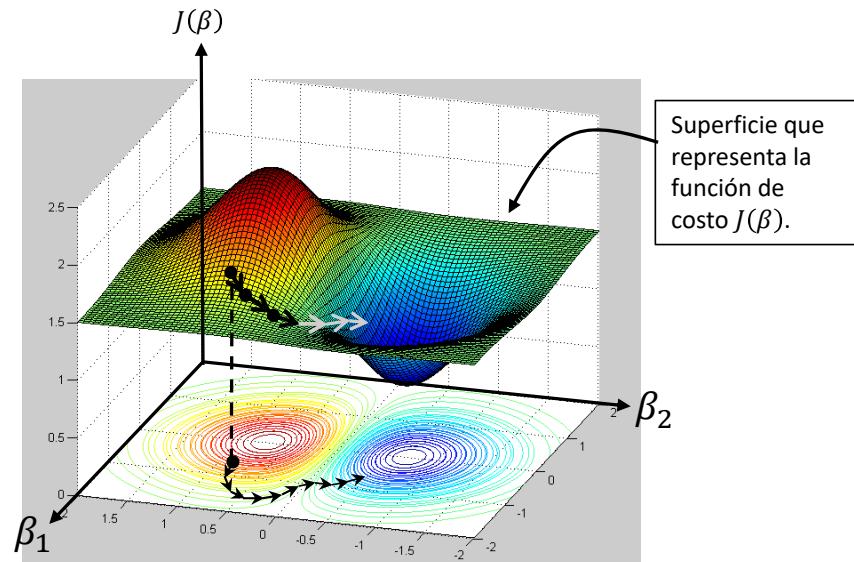
$$y = h_\beta(X) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_m x_m + \varepsilon$$

que minimice la **función de costo  $J$** , es decir:

$$\min_{\beta} \{J(\beta)\} = \min_{\{\beta_k\}} \sum_{k=1}^N (y_k - \beta_0 - \beta_1 x_{k1} - \dots - \beta_M x_{kM})^2$$

Así, esta expresión nos estará diciendo qué tan bien el modelo de regresión lineal  $y = h_\beta(X)$  minimiza la función de costo o de errores  $J$ , para diferentes valores de  $\beta$ .

Gráfico de la función de costo  $J$  en términos de los coeficientes  $\beta$  del hiperplano.



Hiperplano para el caso de dos variables de entrada  $x_1, x_2$ :

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$$

Queremos encontrar los coeficientes  $\beta_k$  que minimicen el valor de la Función de Costo  $J(\beta)$ :

$$\min_{\beta} \{J(\beta)\} = \min_{\{\beta_k\}} \sum_{k=1}^N (y_k - \beta_0 - \beta_1 x_{k1} - \beta_2 x_{k2})^2$$

## Método del Gradiente Descendente

Se desean encontrar las coordenadas de  $\beta$ , que minimicen el valor de la función de costo  $J(\beta)$ .

En cada paso se desea estar más cerca del mínimo de  $J(\beta)$  mediante la siguiente fórmula iterativa:

$$\beta_{(new)} = \beta_{(old)} + \Delta\beta \Big|_{\beta_{(old)}}$$

Para alcanzar el mínimo de la función de costo  $J$ , nos apoyaremos en la dirección negativa de su gradiente:

$$\beta_{(new)} = \beta_{(old)} - \lambda \cdot \nabla J(\beta) \Big|_{\beta=\beta_{(old)}}$$

donde el escalar  $\lambda > 0$  es el llamado tamaño de paso (*learning rate*).

## Método Iterativo del Gradiente Descendente para Minimizar la función de Costo

Al aplicar un método numérico iterativo para mejorar la función de costo  $J(\beta)$  obtenido en un punto  $\beta_{(old)}$ , se deberá obtener el vector de incremento  $\Delta\beta$ , tal que:

$$\beta_{(new)} = \beta_{(old)} + \Delta\beta \Big|_{\beta_{(old)}}$$

resulte en un mejor valor de  $J(\beta)$ .

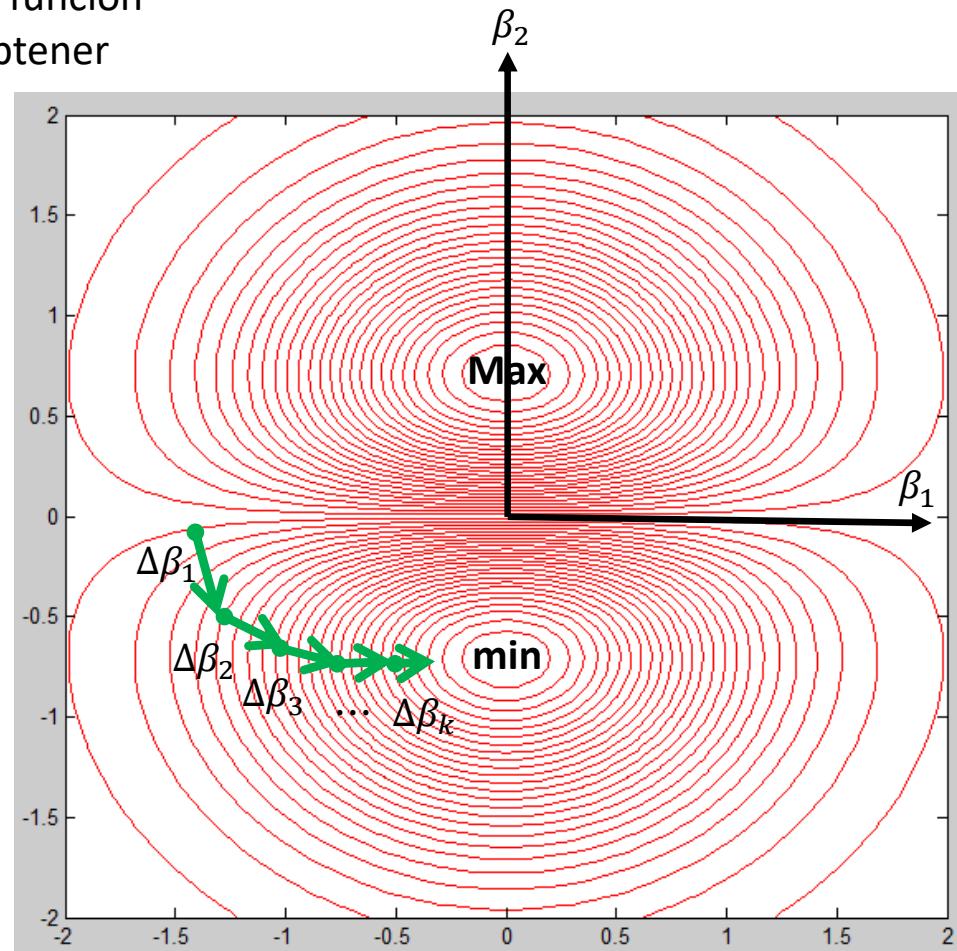
Como es un problema de minimización, podemos utilizar el negativo del vector gradiente,  $-\nabla J(\beta)$ , para obtener el llamado método del **Gradiente Descendente**:

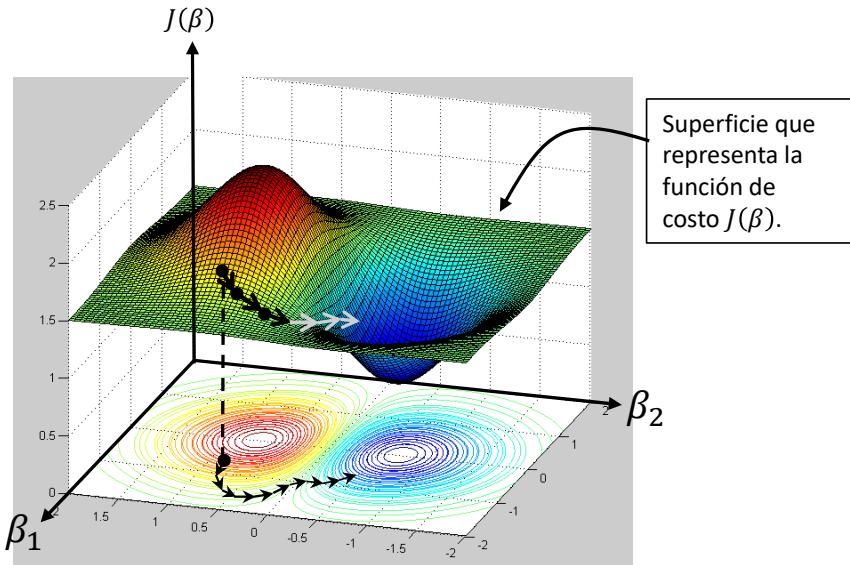
$$\beta_{(new)} = \beta_{(old)} - \lambda \nabla J(\beta) \Big|_{\beta=\beta_{(old)}}$$

donde  $\lambda$  es el llamado **tamaño de paso (learning rate)**.

- Si  $\lambda \gg 0$  el algoritmo puede alejarse del óptimo.
- Si  $\lambda \approx 0$  el algoritmo puede ser muy lento.
- $\lambda$  puede ser dinámico y variar con las iteraciones.

Denotamos por simplicidad como  $\beta$  al vector  $(\beta_1, \beta_2)$ .





Por simplicidad y solo con fines didácticos y poder graficar la superficie de la función de costo en 3 dimensiones, estamos considerando únicamente los pesos  $\beta_1$  y  $\beta_2$ , dejando afuera a  $\beta_0$ .

$$\min_{\beta} \{J(\beta)\} = \min_{\{\beta_k\}} \sum_{k=1}^N (y_k - \beta_0 - \beta_1 x_{k1} - \beta_2 x_{k2})^2$$