Lecture 7: Machine Learning Regularización

Big Data and Machine Learning en el Mercado Inmobiliario Educación Continua

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

May 16, 2023

Agenda

- 1 Recap
- 2 Modelos Lineales
- 3 Regularización
 - Lasso
 - Ridge
 - Elastic net
- 4 Break
- 5 Para seguir leyendo

- 1 Recap
- 2 Modelos Lineales
- 3 Regularización
 - Lasso
 - Ridge
 - Elastic net
- 4 Break
- 5 Para seguir leyendo

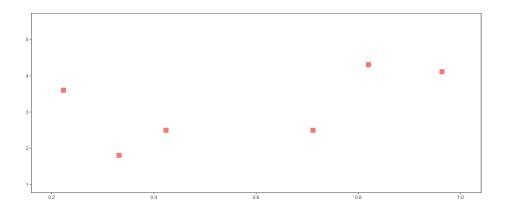
Objetivos

- ► El objetivo es predecir *y* dadas otras variables *X*. Ej: precio vivienda dadas las características
- ► Asumimos que el link entre *y* and *X* esta dado por:

$$y = f(X) + u \tag{1}$$

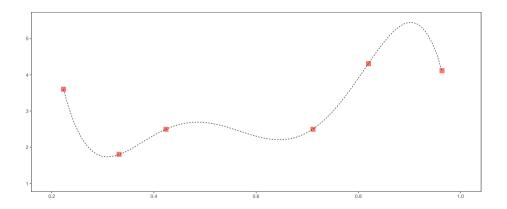
- ightharpoonup donde f(X) es cualquier función,
- *u* una variable aleatoria no observable E(u) = 0 and $V(u) = \sigma^2$

Overfit





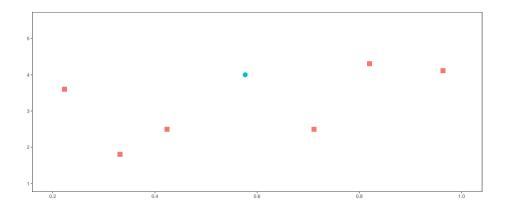
Overfit



Overfit y Predicción fuera de Muestra

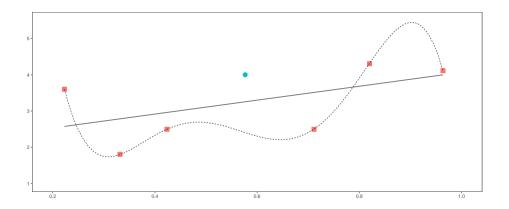
- ML nos interesa la predicción fuera de muestra
- Overfit: modelos complejos predicen muy bien dentro de muestra, pero tienden a hacer un trabajo fuera de muestra
- Hay que elegir el nivel adecuado de complejidad

Overfit





Overfit



Overfit y Predicción fuera de Muestra

Selección de Modelos

- ML nos interesa la predicción fuera de muestra
- Overfit: modelos complejos predicen muy bien dentro de muestra, pero tienden a hacer un mal trabajo fuera de muestra
- Hay que elegir el modelo que "mejor" prediga
 - Métodos de Remuestreo
 - Enfoque del conjunto de validación
 - ► Loocv
 - Validación cruzada en K-partes (5 o 10)

- 1 Recap
- 2 Modelos Lineales
- 3 Regularizaciór
 - Lasso
 - Ridge
 - Elastic net
- 4 Break
- 5 Para seguir leyendo

Modelos Lineales

► El problema es:

$$y = f(X) + u \tag{2}$$

Modelos Lineales

► El problema es:

$$y = f(X) + u \tag{2}$$

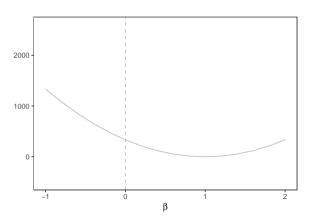
proponemos :

$$f(X) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p \tag{3}$$

$$Precio_i = \beta Habitaciones_i + \epsilon_i$$
 (4)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2$$
 (5)

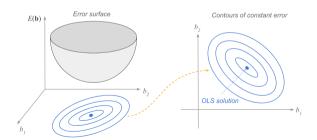
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2$$
 (6)



Intuición en 2 Dimensiones (OLS)

$$Precio_{i} = \beta_{1} Habitaciones_{i} + \beta_{2} Superficie_{i} + \epsilon$$
 (7)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i2}\beta_2)^2$$
(8)



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

- 1 Recap
- 2 Modelos Lineales
- 3 Regularización
 - Lasso
 - Ridge
 - Elastic net
- 4 Break
- 5 Para seguir leyendo

Lasso

Para un $\lambda \geq 0$ dado, consideremos el siguiente problema de optimización

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$
 (9)

Lasso

lacktriangle Para un $\lambda \geq 0$ dado, consideremos el siguiente problema de optimización

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$
 (9)

- ► "LASSO's free lunch": selecciona automáticamente los predictores que van en el modelo $(\beta_j \neq 0)$ y los que no $(\beta_j = 0)$
- ▶ Porque? Los coeficientes que no van son soluciones de esquina
- \triangleright $E(\beta)$ es no differentiable



Lasso Intuición en 1 Dimension

Lasso Intuición

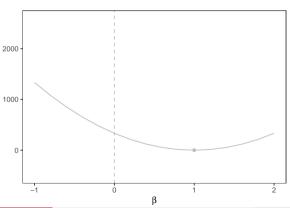
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
 (10)

- Un solo predictor, un solo coeficiente
- ightharpoonup Si $\lambda = 0$

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2$$
(11)

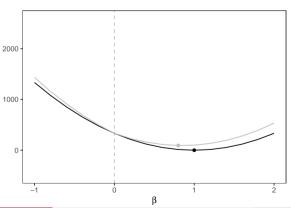


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
 (12)



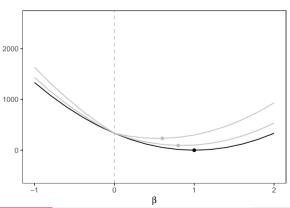


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(13)



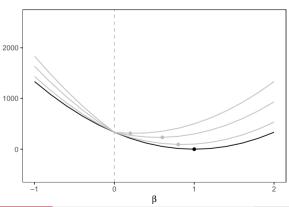


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(14)



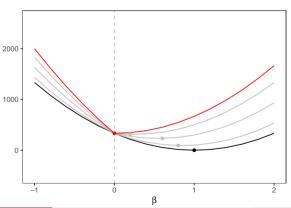


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(15)



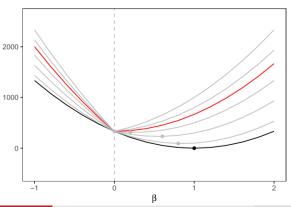


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(16)





$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(17)



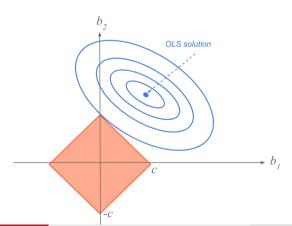
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(18)

la solución analítica es

$$\hat{\beta}_{lasso} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda \ge \lambda^* \\ \hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda}{2} & \text{si } \lambda < \lambda^* \end{cases}$$
 (19)

Intuición en 2 Dimensiones (Lasso)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } (|\beta_1| + |\beta_2|) \le c$$
 (20)



Ridge

ightharpoonup Para un $\lambda \geq 0$ dado, consideremos ahora el siguiente problema de optimización

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2$$
 (21)

La intuición es similar a lasso, pero la vamos a extender a 2-Dim



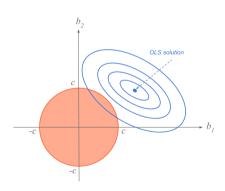
► Al problema

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2$$
 (22)

podemos escribirlo como

$$\min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2$$
sujeto a
$$((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
(23)

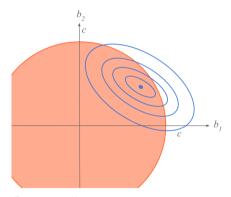
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (24)



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io



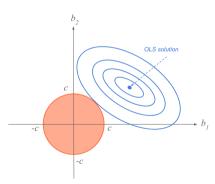
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (25)



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io



$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (26)



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Comentarios técnicos

- Lasso y ridge son sesgados, pero las disminuciones en varianza pueden compensar estoy y llevar a un MSE menor
- Lasso encoje a cero, Ridge no tanto
- ► Importante para aplicación:
 - Estandarizar los datos (media 0, y varianza 1)
 - ightharpoonup Como elegimos λ ?
 - Utilizando validación cruzada

Elastic net

► Elastic Net es un happy medium

$$min_{\beta}EL(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \alpha\lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| + (1 - \alpha)\lambda \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2$$
 (27)

- ightharpoonup Si $\alpha = 1$ Lasso
- ► Si $\alpha = 0$ Ridge
- ▶ How to choose (α, λ) ? → Crossvalidation Bidimensional

Break

Para seguir leyendo

- ► Friedman, J., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2001). The elements of statistical learning (Vol. 1, No. 10). New York: Springer series in statistics.
- ▶ James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2013). An introduction to statistical learning (Vol. 112, p. 18). New York: springer.
- ▶ Kohavi, R. (1995). A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection. In Ijcai (Vol. 14, No. 2, pp. 1137-1145).
- ► Lovelace, R., Nowosad, J., & Muenchow, J. (2019). Geocomputation with R. CRC Press. (Chapters 2 & 6)