Lecture 6: Machine Learning Paradigma Predictivo

Big Data and Machine Learning en el Mercado Inmobiliario Educación Continua

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

October 20, 2022

Agenda

Modelo Hedónico

- Podemos entonce estimar la función hedónica utilizando precio de las propiedades y las características de la misma

$$P = f(atrib_1, atrib_2, \ldots, atrib_n) \tag{1}$$

- Sin embargo, la teoría no nos dice poco sobre
  - Cuáles son o cómo medir estos atributos que influyen sobre el precio
  - Como estas características influyen en el precio (forma funcional)

Estadística clásica vs la máquina de aprender

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

- Estadística Clásica
  - Inferencia
  - $f()$ "correcta" el interes es en entender como y afecta X
  - modelos surge de la teoria/experimentos
  - Interés es en test de hipótesis (std. err., ci's)
- Maquina de Aprender
  - Interés es predecir y
  - El $f()$ correcto es el que predice mejor
  - Modelo?

¿Qué es la máquina de aprender?

- El aprendizaje de máquinas es una rama de la informática y la estadística, encargada de desarrollar algoritmos para predecir los resultados y a partir de las variables observables X.
- La parte de aprendizaje proviene del hecho de que no especificamos cómo exactamente la computadora debe predecir y a partir de X.
- Esto queda como un problema empírico que la computadora puede "aprender".
- En general, esto significa que nos abstraemos del modelo subyacente, el enfoque es muy pragmático

¿Qué es la máquina de aprender?

- El aprendizaje de máquinas es una rama de la informática y la estadística, encargada de desarrollar algoritmos para predecir los resultados y a partir de las variables observables X.
- La parte de aprendizaje proviene del hecho de que no especificamos cómo exactamente la computadora debe predecir y a partir de X.
- Esto queda como un problema empírico que la computadora puede ”aprender”.
- En general, esto significa que nos abstraemos del modelo subyacente, el enfoque es muy pragmático

“Lo que sea que funciona, funciona...”

“Lo que sea que funciona, funciona...”

Tipos de Aprendizaje

- ML se divide en dos ramas principales:
  1. Aprendizaje supervisado: Tenemos datos tanto sobre un resultado y como sobre las variables explicativas X.
     - Esto es lo más cercano al análisis de regresión que conocemos.
     - Si y es discreto, también podemos ver esto como un problema de clasificación.
     - Es el enfoque de este curso.
  2. Aprendizaje no supervisado: No tenemos datos sobre y, solo sobre X.
     - Queremos agrupar estos datos (sin especificar qué agrupar).
     - Permite reducir la dimensionalidad y explorar datos
     - Algunos algoritmos destacados: PCA, y K-medias

Predicción y Error Predictivo

- 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 el modelo:

$$y = f(X) + u \tag{3}$$

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

Como medimos: “Lo que sea que funciona, funciona...”

- En la práctica no conocemos $f(X)$
- Es necesario “aprenderla” (estimarla) $\hat{y} = \hat{f}(X)$
- La medida de cuán bien funciona nuestro modelo es

$$MSE(\hat{y}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{4}$$

Como medimos: "Lo que sea que funciona, funciona..."

- Podemos descomponer el *MSE* en dos partes

$$MSE(\hat{y}) = MSE(\hat{f}) + \sigma^2 \tag{5}$$

- el error de estimar f con $\hat{f}$. (*reducible*)
- el error de no observar u. (*irreducible*)

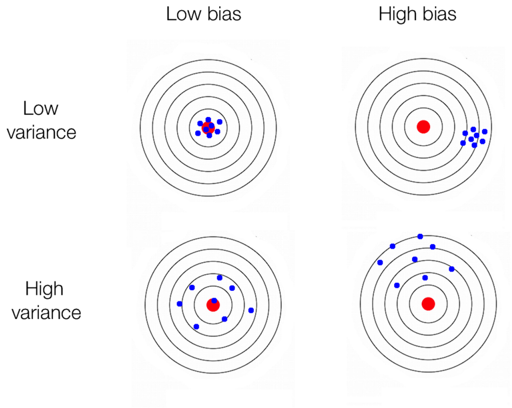
Predicción y Error Predictivo

- Descomponiendo un poco más:

$$
\begin{align}
Err(Y) &= MSE(\hat{f}) + \sigma^2 \tag{6} \\
&= Bias^2(\hat{f}) + V(\hat{f}) + Error\ Irreducible \tag{7}
\end{align}
$$

- Este resultado es muy importante,
  - Aparece el dilema entre sesgo y varianza

Dilema sesgo/varianza



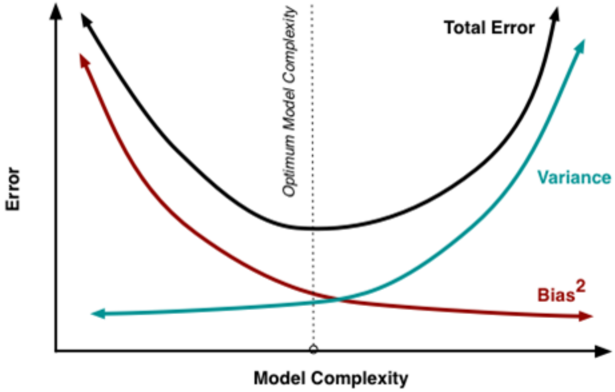
Source: https://tinyurl.com/y4lvjxpc

Dilema sesgo/varianza

- El secreto de ML: admitiendo un poco de sesgo podemos tener ganancias importantes en varianza

Dilema sesgo/varianza

- El secreto de ML: admitiendo un poco de sesgo podemos tener ganancias importantes en varianza



Source: https://tinyurl.com/y4lvjxpc

Predicción y regresión lineal

- El problema es:

$$y = f(X) + u \tag{8}$$

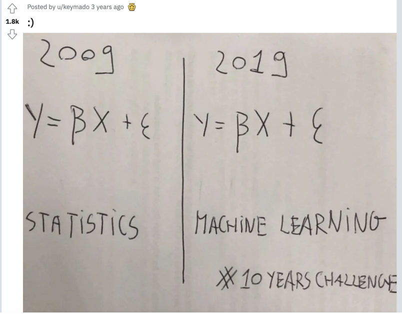
Predicción y regresión lineal

- El problema es:

$$y = f(X) + u \tag{8}$$

- proponemos :

$$f(X) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_p X_p \tag{9}$$



Fuente: https://www.reddit.com/r/datascience/comments/ah0g69/_/

Predicción y regresión lineal

- Y el dilema sesgo varianza?

Predicción y regresión lineal

- Y el dilema sesgo varianza?
- Bajo los supuestos clásicos (Gauss-Markov) el estimador de OLS es insesgado:

$$
\begin{aligned}
E(X\hat{\beta}) &= E(\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2 X_2 + \cdots + \hat{\beta}_p X_p) && (10)\\
&= E(\hat{\beta}_1) + E(\hat{\beta}_2) X_2 + \cdots + E(\hat{\beta}_p) X_p && (11)\\
&= X\beta && (12)
\end{aligned}
$$

- $MSE(\hat{y})$ se reduce a $V(\hat{\beta})$

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

- En la econometría clásica, la elección de modelos se resume a elegir entre modelos más pequeños y más grandes.
- Considere los siguientes modelos para estimar y:

$$y = \beta_1 X_1 + u_1$$

- $\hat{\beta}_1^{(1)}$ el estimador de OLS y on X_1
- La predicción es:

$$\hat{y}^{(1)} = \hat{\beta}_1^{(1)} X_1$$

$$y = \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + u_2$$

- $\hat{\beta}_1^{(2)}$ y $\hat{\beta}_2^{(2)}$ con β_1 y β_2 los el estimador de OLS de y en X_1 y X_2.
- La predicción es:

$$\hat{y}^{(2)} = \hat{\beta}_1^{(2)} X_1 + \hat{\beta}_2^{(2)} X_2$$

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

- Una discusión importante en la econometría clásica es la de la omisión de variables relevantes frente a la inclusión de variables irrelevantes.
  - Si el modelo (1) es verdadero entonces estimar el modelo más grande (2) conduce a estimadores ineficientes aunque no sesgados debido a que incluyen innecesariamente X_2.

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```r
#Load Packages
require("tidyverse")
require("fabricatr")
require("stargazer")

#for reproducibility
set.seed(101010)



db1 <- fabricate(
  N = 10000,
  ability=rnorm(N,mean=.5,sd=2),
  schooling = round(runif(N, 2, 14)),
  logwage =rnorm(N, mean=7+.15*schooling, sd=2)
)
```

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```
reg1<-lm(logwage~schooling,db1)
reg2<-lm(logwage~schooling+ability,db1)
stargazer(reg1,reg2,type="text")
```

```
##
## =====================================================================
##                                    Dependent variable:
##                     -------------------------------------------------
##                                          logwage
##                               (1)                       (2)
## ---------------------------------------------------------------------
## schooling                  0.145***                  0.145***
##                             (0.006)                   (0.006)
##
## ability                                               0.007
##                                                       (0.010)
##
## Constant                   7.050***                  7.046***
##                             (0.051)                   (0.051)
##
## ---------------------------------------------------------------------
## Observations                10,000                    10,000
## R2                           0.059                     0.059
## =====================================================================
## Note:                                       *p<0.1; **p<0.05; ***p<0.01
```

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```
db1<- db1 %>% mutate(yhat_reg1=predict(reg1),
                     yhat_reg2=predict(reg2))

var(db1$yhat_reg1)
```

```
## [1] 0.2522197
```

```
var(db1$yhat_reg2)
```

```
## [1] 0.2524032
```

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

- Una discusión importante en la econometría clásica es la de la omisión de variables relevantes frente a la inclusión de variables irrelevantes.
  - Si el modelo (1) es verdadero entonces estimar el modelo más grande (2) conduce a estimadores ineficientes aunque no sesgados debido a que incluyen innecesariamente X_2.
  - Si el modelo (2) se verdadero, estimar el modelo más pequeño (1) conduce a una estimación de menor varianza pero sesgada si X_1 también se correlaciona con el regresor omitido X_2.

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```
db2 <- fabricate(
  N = 10000,
  ability=rnorm(N,mean=.5,sd=2),
  schooling = round(runif(N, 2, 14)),
  schooling = round(ceiling(schooling+1*ability)),
  logwage =rnorm(N, mean=7+.15*schooling+.25*ability, sd=2)
)
```

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```
reg3<-lm(logwage~schooling,db2)
reg4<-lm(logwage~schooling+ability,db2)
stargazer(reg3,reg4,type="text")
```

```
##
## ===========================================================================
##                                      Dependent variable:
##                          --------------------------------------------------
##                                            logwage
##                                  (1)                        (2)
## ---------------------------------------------------------------------------
## schooling                     0.216***                   0.153***
##                                (0.005)                    (0.006)
##
## ability                                                   0.254***
##                                                           (0.011)
##
## Constant                      6.563***                   7.007***
##                                (0.051)                    (0.053)
##
## ---------------------------------------------------------------------------
## Observations                   10,000                     10,000
## R2                              0.152                      0.192
## ===========================================================================
## Note:                                          *p<0.1; **p<0.05; ***p<0.01
```

Complejidad y compensación de varianza/sesgo

Ejemplo

```
db2$yhat_reg3<-predict(reg3)
db2$yhat_reg4<-predict(reg4)

var(db2$yhat_reg3)
```

```
## [1] 0.755213
```

```
var(db2$yhat_reg4)
```

```
## [1] 0.9538193
```

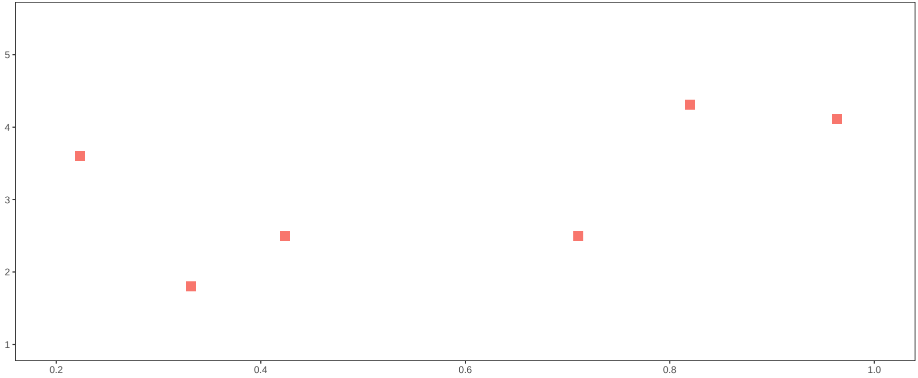
Complejidad y compensación de varianza/sesgo

- Una discusión importante en la econometría clásica es la de la omisión de variables relevantes frente a la inclusión de variables irrelevantes.
  - Si el modelo (1) es verdadero entonces estimar el modelo más grande (2) conduce a estimadores ineficientes aunque no sesgados debido a que incluyen innecesariamente X_2.
  - Si el modelo (2) se verdadero, estimar el modelo más pequeño (1) conduce a una estimación de menor varianza pero sesgada si X_1 también se correlaciona con el regresor omitido X_2.
- Esta discusión de pequeño vs grande siempre es con respecto a un modelo que se supone es verdadero.
- Pero en la práctica el modelo verdadero es desconocido!!!

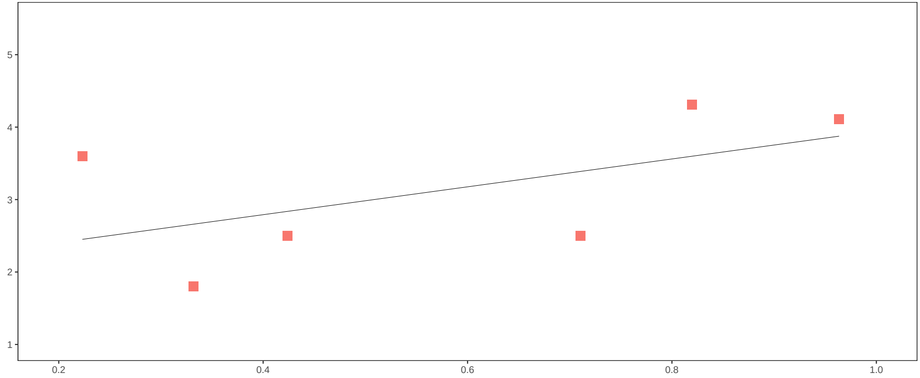
Complejidad y compensación de varianza/sesgo

- Elegir entre modelos implica un dilema *sesgo/varianza*
- La econometría clásica tiende a resolver este dilema abruptamente,
  - requiriendo una estimación no sesgada y, por lo tanto, favoreciendo modelos más grandes para evitar sesgos
- En esta configuración simple, los modelos más grandes son "más complejos", por lo que los modelos más complejos están menos sesgados pero son más ineficientes.
- Por lo tanto, en este marco muy simple, la complejidad se mide por el número de variables explicativas.
- Una idea central en el aprendizaje automático es generalizar la idea de complejidad,
  - Nivel óptimo de complejidad, es decir, modelos cuyo sesgo y varianza conducen al menor MSE.

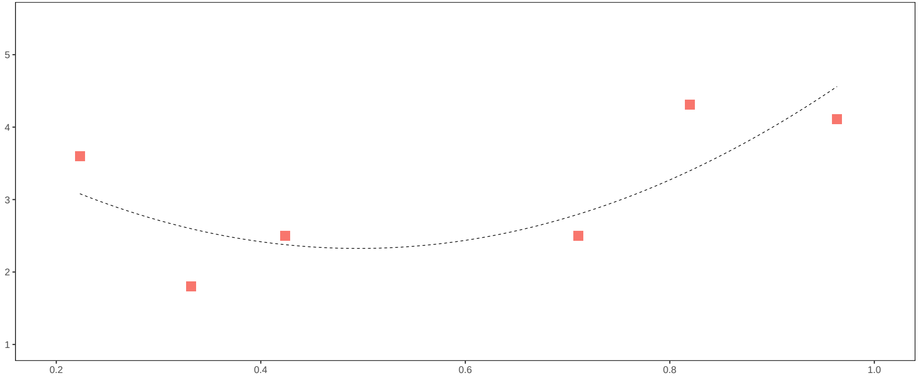
Sobreajuste



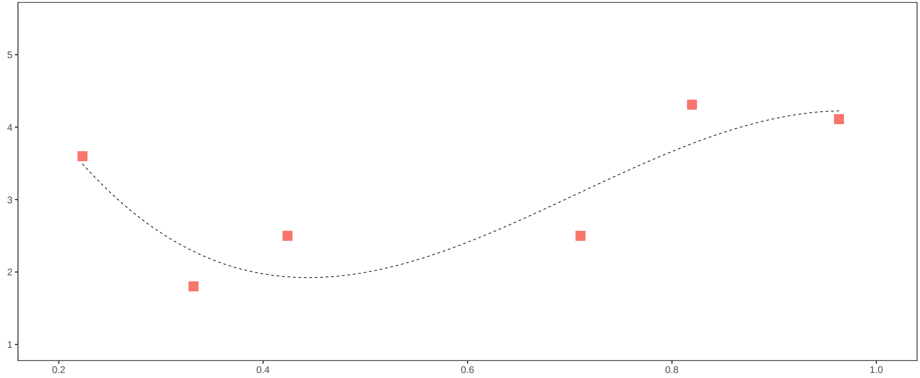
Sobreajuste



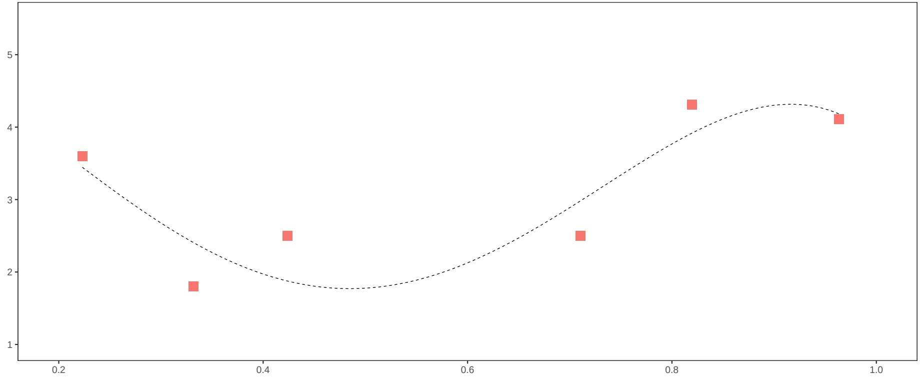
Sobreajuste



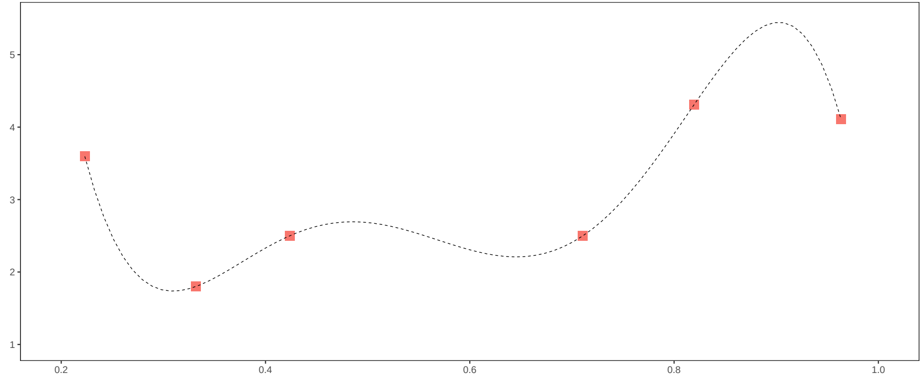
Sobreajuste



Sobreajuste



Sobreajuste



Sobreajuste

- Notemos que esto no es otra cosa que la suma de los residuales al cuadrado

$$
\begin{aligned}
MSE &= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{f}(X))^2 && (13)\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2 && (14)\\
&= \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(e)^2 && (15)\\
&= RSS && (16)
\end{aligned}
$$

- Esta medida nos da una idea de *lack of fit* que tan mal ajusta el modelo a los datos

Sobreajuste

- Un problema del RSS es que nos da una medida absoluta de ajuste de los datos, y por lo tanto no esta claro que constituye un buen RSS.
- Una alternativa muy usada en economía es el R^2
- Este es una proporción (la proporción de varianza explicada),
  - toma valores entre 0 y 1,
  - es independiente de la escala (o unidades) de y

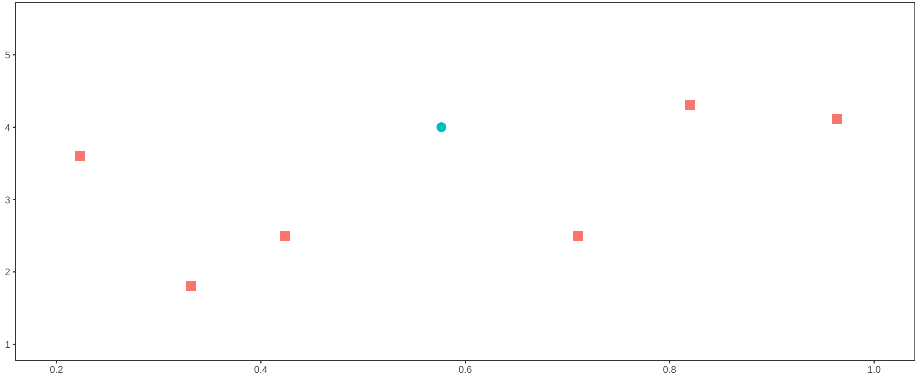
$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \bar{y})^2} \tag{17}$$

$$= 1 - \frac{RSS}{TSS} \tag{18}$$

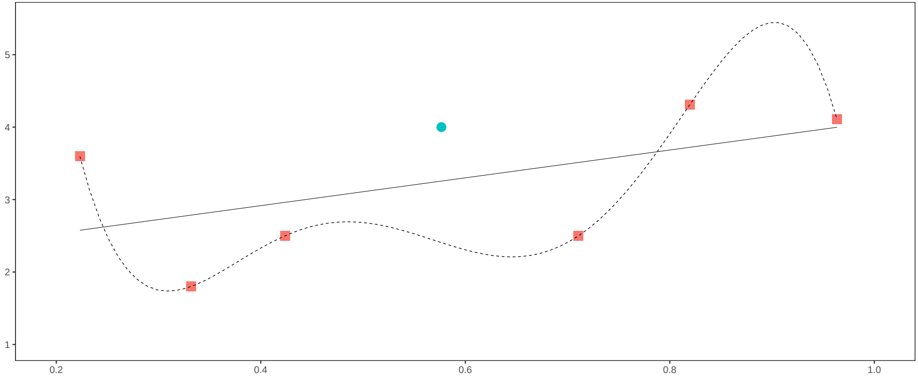
Sobreajuste y Predicción fuera de Muestra

- 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
- Como medimos el error de predicción fuera de muestra?
- R^2 no funciona: se concentra en la muestra y es no decreciente en complejidad

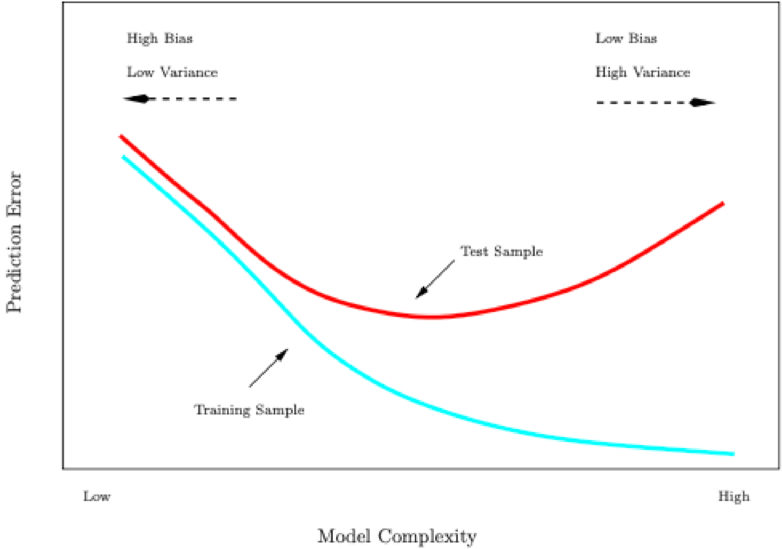
Sobreajuste y Predicción fuera de Muestra



Sobreajuste y Predicción fuera de Muestra



Sobreajuste y Predicción fuera de Muestra



Selección de Modelo AIC (Akaike Information Criterion)

- Akaike (1969) fue el primero en ofrecer un enfoque unificado al problema de la selección de modelos.
- Su punto de vista fue elegir un modelo del conjunto f_i que funcionó bien cuando se evaluó sobre la base del rendimiento de la previsión.
- Su criterio, que ha llegado a llamarse criterio de información de Akaike, es

$$AIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2\right) - p_j \tag{19}$$

Selección de Modelos: SIC/BIC (Schwarz/Bayesian Information Criterion)

- Schwarz (1978) mostró que, si bien el enfoque *AIC* puede ser bastante satisfactorio para seleccionar un modelo de pronóstico
- Sin embargo, tiene la desafortunada propiedad de que es inconsistente, (cuando $n \to \infty$, tiende a elegir un modelo demasiado grande con probabilidad positiva)
- Schwarz (1978) formalizó el problema de selección de modelos desde un punto de vista bayesiano:

$$SIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2\right) - \frac{1}{2}p_j log(n) \tag{20}$$

AIC vs BIC

$$AIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2\right) - p_j \tag{21}$$

$$SIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y})^2\right) - p_j\frac{1}{2}log(n) \tag{22}$$

- Note que

$$\frac{1}{2}log(n) > 1 \;\; for \;\; n > 8 \tag{23}$$

- La penalidad de SIC es mayor que la penalidad de AIC,
- SIC tiende a elegir modelos más pequeños.
- En efecto, al dejar que la penalización tienda al infinito lentamente con n, eliminamos la tendencia de AIC a elegir un modelo demasiado grande.

Error de Prueba y de Entrenamiento

- Dos conceptos importantes
  - *Test Error*: es el error de predicción en la muestra de prueba (test)

$$Err_{\mathcal{T}est} = MSE[(y,\hat{y})|\mathcal{T}est] \tag{24}$$

  - *Training error*:es el error de predicción en la muestra de entrenamiento (training)

$$Err_{\mathcal{T}rain} = MSE[(y,\hat{y})|\mathcal{T}rain] \tag{25}$$

Train and test samples

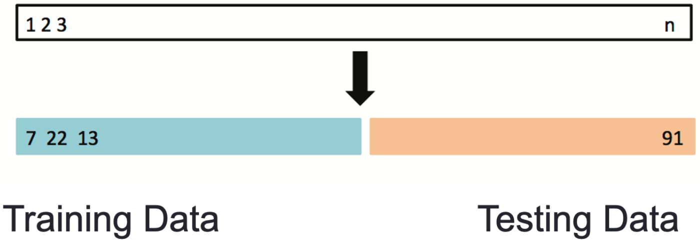
- Cómo elegimos $\mathcal{T}est$?

Train and test samples

- Cómo elegimos $\mathcal{T}est$?
- Una alternativa simple seria dividir los datos en dos:
  - Training sample: para construir/estimar/entrenar el modelo
  - Test sample: para evaluar el desempeño
- Desde una perspectiva estrictamente clásica
  - Tiene sentido si los datos de entrenamiento son iid de la población, incluso funciona si es iid condicional en X
  - Dos problemas con esta idea:
    - El primero es que, dado un conjunto de datos original, si parte de él se deja de lado para probar el modelo, quedan menos datos para la estimación (lo que lleva a una menor eficiencia).
    - Un segundo problema es cómo decidir qué datos se usarán para entrenar el modelo y cuáles probarlo.

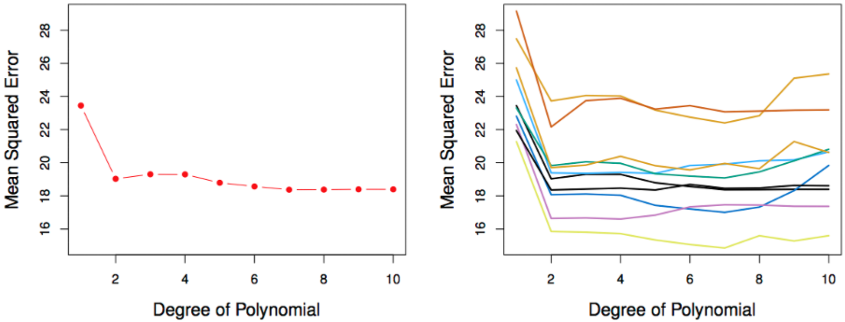
Enfoque de conjunto de validación

- Podemos entonces aproximar esta idea partiendo la muestra en 2



Enfoque de conjunto de validación

- Modelo $y = f(x) + u$ donde f es un polinomio de grado p^*.
  - Izquierda: error de predicción en la muestra de prueba para una sola partición
  - Derecha: error de predicción en la muestra de prueba para varias particiones
  - Hay un montón de variabilidad. (Necesitamos algo más estable)

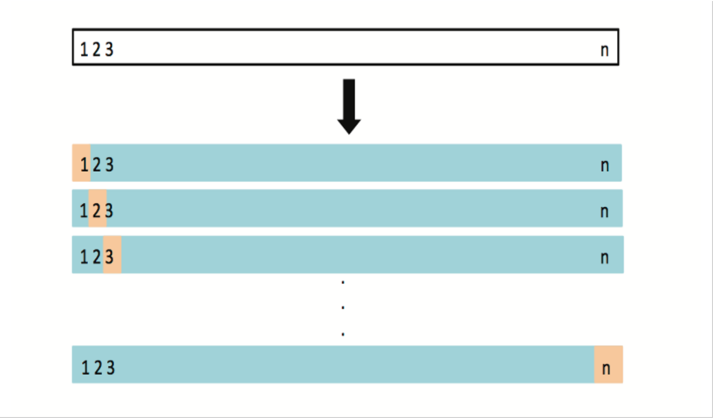


Enfoque de conjunto de validación

- Ventajas:
  - Simple
  - Fácil de implementar
- Desventajas:
  - El MSE de validación (prueba) puede ser altamente variable
  - Solo se utiliza un subconjunto de observaciones para ajustar el specificationo (datos de entrenamiento). Los métodos estadísticos tienden a funcionar peor cuando se entrenan con pocas observaciones.

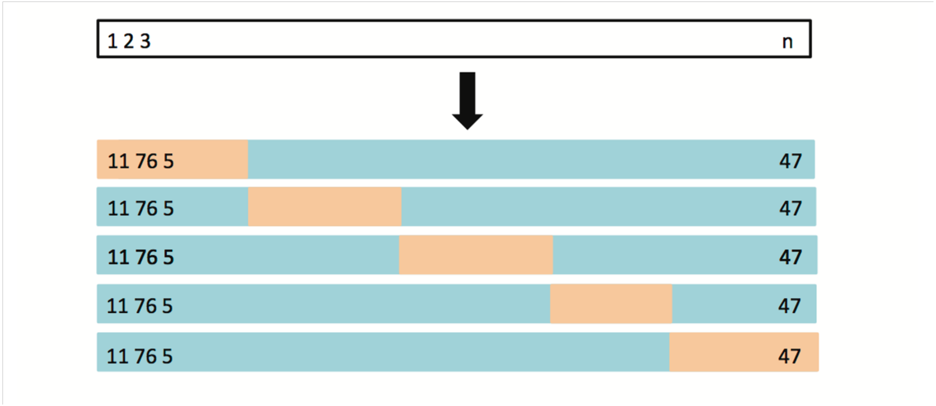
Leave-One-Out Cross Validation (LOOCV)

- Este método es similar al enfoque de validación, pero trata de abordar las desventajas de este último.



Validación cruzada en K-partes

- LOOCV es computacionalmente intensivo, por lo que podemos ejecutar k-fold Cross Validation



Validación cruzada en K-partes

- Dividir los datos en K partes $(N = \sum_{j=1}^{K} n_j)$
- Ajustar el modelo dejando afuera una de las partes (folds) $\rightarrow f_{-k}(x)$
- Calcular el error de predicción en la parte (fold) que dejamos afuera

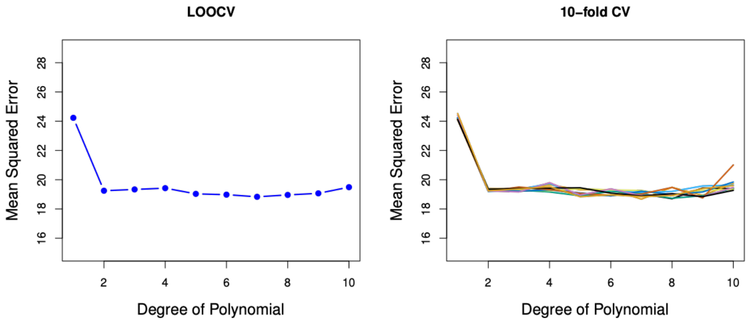
$$MSE_j = \frac{1}{n_j} \sum (y_j^k - \hat{y}_{-j})^2 \tag{26}$$

- Promediar

$$CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{k} MSE_j \tag{27}$$

Validación cruzada en K-partes

- Izquierda: LOOCV error
- Derecha: 10-fold CV
- LOOCV es caso especial de k-fold, donde k = n
- Ambos son estables, pero LOOCV (generalmente) es mas intensivo computacionalmente!



Trade-off Sesgo-Varianza para validación cruzada en K-partes

- Sesgo:
  - El enfoque del conjunto de validación tiende a sobreestimar el error de predicción en la muestra de prueba (menos datos, peor ajuste)
  - LOOCV, agrega más datos $\rightarrow$ menos sesgo
  - K-fold un estado intermedio
- Varianza:
  - LOOCV promediamos los resultados de n modelos ajustados, cada uno está entrenado en un conjunto casi idéntico de observaciones $\rightarrow$ altamente correlacionado
  - K partes esta correlación es menor, estamos promediando la salida de k modelo ajustado que están algo menos correlacionados
- Por lo tanto, existe un trade-off
  - Tendemos a usar k-fold CV con ($K = 5$ y $K = 10$)
  - Se ha demostrado empíricamente que producen estimaciones del error de prediccion que no sufren ni de un sesgo excesivamente alto ni de una varianza muy alta Kohavi (1995)

Validation and Cross-validation en la práctica

248 *QUARTERLY JOURNAL OF ECONOMICS*

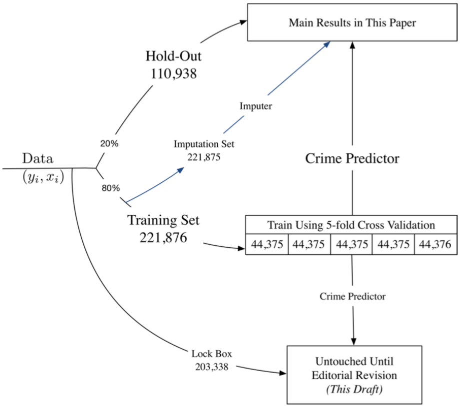


FIGURE I

Partition of New York City Data (2008–13) into Data Sets Used for Prediction and Evaluation

Source: Kleinberg et al (2018)

Para seguir leyendo

- Davidson, R., & MacKinnon, J. G. (2004). Econometric theory and methods (Vol. 5). New York: Oxford University Press.

- James, G., Witten, D., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2013). An introduction to statistical learning (Vol. 112, p. 18). New York: springer.

- Friedman, J., Hastie, T., & Tibshirani, R. (2001). The elements of statistical learning (Vol. 1, No. 10). New York: Springer series in statistics.

- Murphy, K. P. (2012). Machine learning: a probabilistic perspective. MIT press.

- Rosen, S. (1974). Hedonic prices and implicit markets: product differentiation in pure competition. Journal of political economy, 82(1), 34-55.

Break