Selección de Modelos y Regularización

Big Data y Machine Learning para Economía Aplicada

Ignacio Sarmiento-Barbieri

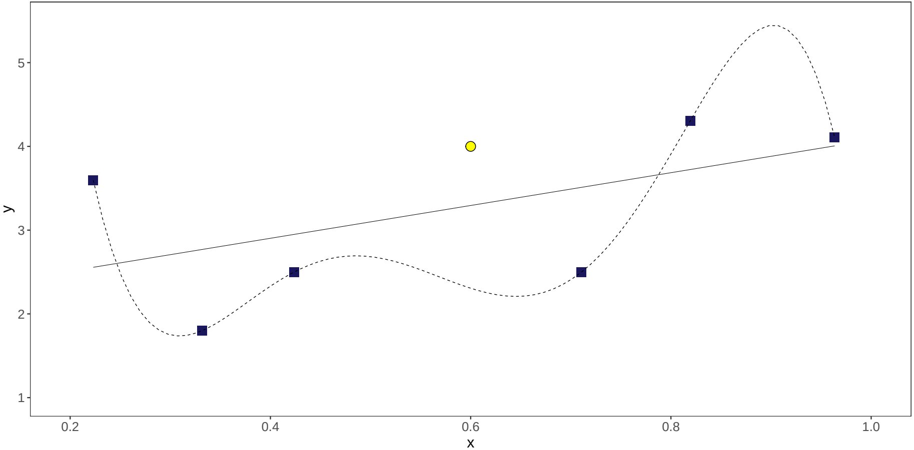
Universidad de los Andes

Agenda

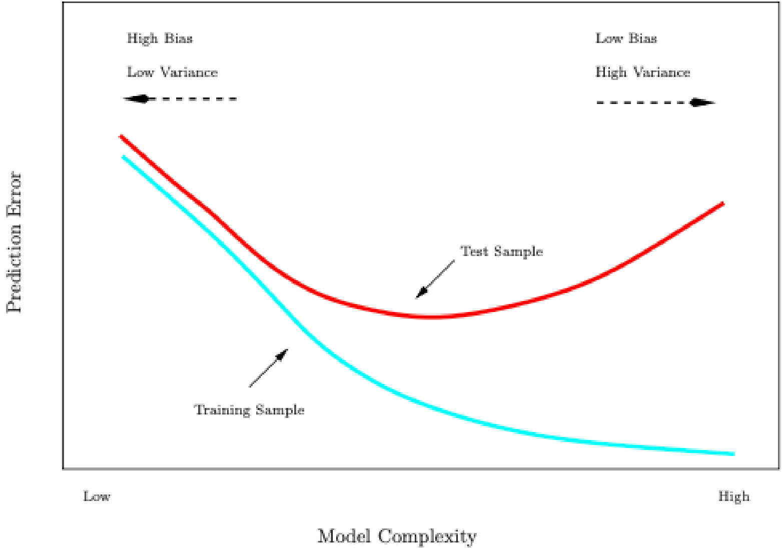
Agenda

1. Recap: Predicción y Overfit
2. Regularización
   - Recap: OLS Mechanics
   - Ridge

Overfit y Predicción fuera de Muestra



Overfit y Predicción fuera de Muestra



Overfit y Predicción fuera de Muestra

- ML nos interesa la predicción fuera de muestra

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 mal trabajo fuera de muestra
- Hay que elegir el modelo que "mejor" prediga fuera de muestra (out-of-sample)
  - Métodos de Remuestreo
    - Enfoque del conjunto de validación
    - LOOCV
    - Validación cruzada en K-partes (5 o 10)

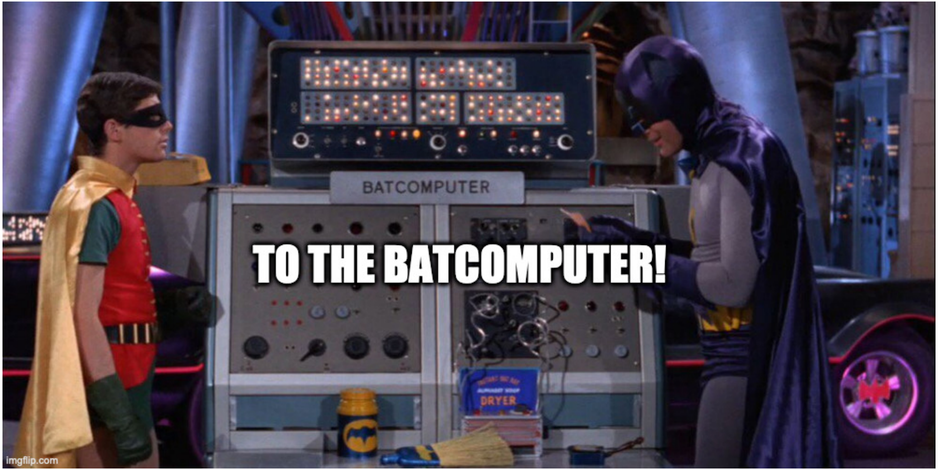


photo from https://www.dailydot.com/parsec/batman-1966-labels-tumblr-twitter-vine/

Agenda

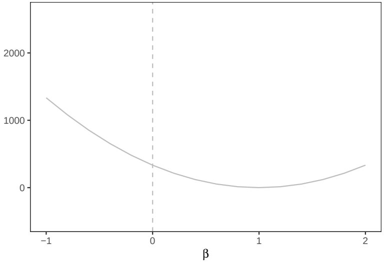
1. Recap: Predicción y Overfit

2. Regularización
   - Recap: OLS Mechanics
   - Ridge

Agenda

OLS 1 Dimension

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



Solution

$$\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - x_i\beta)(-x_i) \tag{2}$$

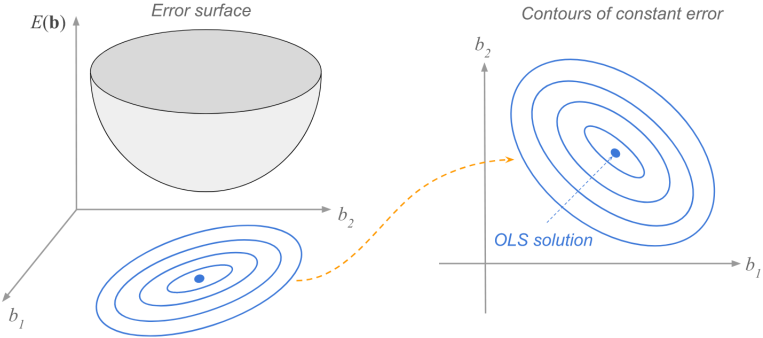
OLS 1 Dimension

$$\frac{\partial E(\beta)}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^{n} 2(y_i - x_i\beta)(-x_i) \tag{3}$$

$$\hat{\beta} = \frac{\sum y_i x_i}{\sum x_i^2} \tag{4}$$

OLS 2 Dimensiones

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i2}\beta_2)^2 \tag{5}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

App

Agenda

Ridge

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

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2 \tag{6}$$

Ridge: Intuición en 1 Dimension

- 1 predictor estandarizado
- El problema entonces es

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta^2 \tag{7}$$

- La solución?

Ridge: Intuición en 2 Dimensiones

- Al problema en 2 dimensiones podemos escribirlo como

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

- podemos escribirlo como un problema de optimización restringido

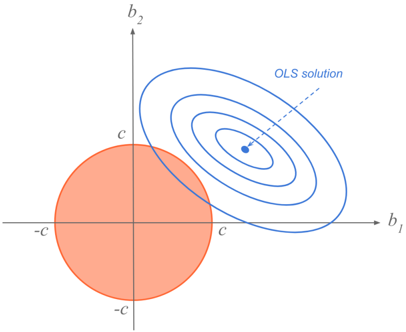
$$min_\beta E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \tag{9}$$

sujeto a

$$\left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c$$

Ridge: Intuición en 2 Dimensiones

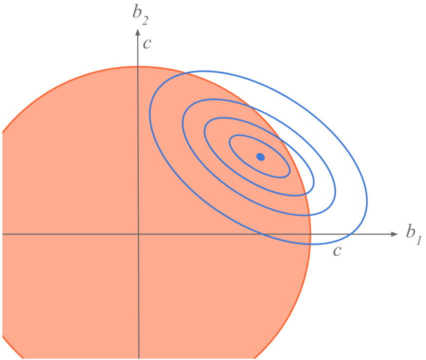
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{10}$$



Fuente: `https://allmodelsarewrong.github.io`

Ridge: Intuición en 2 Dimensiones

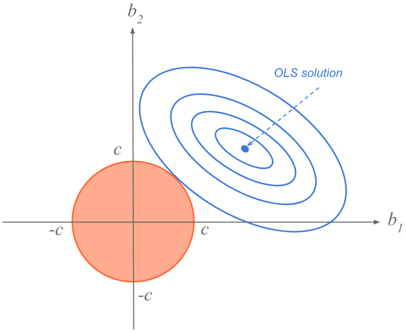
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{11}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Ridge: Intuición en 2 Dimensiones

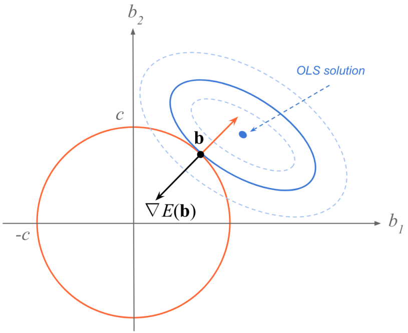
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{12}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Ridge: Intuición en 2 Dimensiones

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{13}$$



Fuente: `https://allmodelsarewrong.github.io`

Formalmente

- Las Xs están centradas, media cero.
- OLS
  - Regresión Simple $y = \beta x + u$

$$\hat{\beta} = \frac{\sum x_i y_i}{\sum x_i^2}$$

  - Regresión múltiple y álgebra matricial

$$\hat{\beta}_{OLS} = (X'X)^{-1}X'y$$

- Ridge

$$\hat{\beta}_{ridge} = (X'X + \lambda I_p)^{-1}X'y$$

Formalmente

$$\hat{\beta}_{ridge} = (X'X + \lambda I_p)^{-1} X'y$$

- Ridge es sesgado $E(\hat{\beta}_{ridge}) \neq \beta$
- Pero la varianza es menor que la de OLS
- Para ciertos valores del parámetro λ $MSE_{OLS} > MSE_{ridge}$

Consequencias: Ridge no es invariante a las escala

- La escala de las variables importa en Ridge, mientras que en OLS no.
- Supongamos $z = c * x$
- Vamos a mostrar que $\hat{y}_i^z = \hat{y}_i^x$
- Partamos de hacer la regression

$$y_i = \beta_0^z + \beta_1^z z_i + u \tag{14}$$

$$\hat{\beta}_1^z = \frac{\sum(z_i - \bar{z})(y_i - \bar{y})}{\sum(z_i - \bar{z})^2} \tag{15}$$

- Pero $z = c * x$

$$\hat{\beta}_1^z = \frac{\sum(cx_i - c\bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum(cx_i - c\bar{x})^2} \tag{16}$$

$$= \frac{1}{c}\frac{\sum(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum(x_i - \bar{x})^2} \tag{17}$$

$$= \frac{1}{c}\hat{\beta}_1^x \tag{18}$$

Consequencias: Ridge no es invariante a las escala

- Entonces

$$\hat{\beta}_1^z z_i = \hat{\beta}_1^z c x_i \tag{19}$$

$$= \frac{1}{c}\hat{\beta}_1^x c x_i \tag{20}$$

$$= \hat{\beta}_1^x x_i \tag{21}$$

$$\tag{22}$$

Consequencias: Ridge no es invariante a las escala

- En términos generales, si $Z = cX$

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}^{Z}_{OLS} &= (Z'Z)^{-1}Z'y \\
&= ((cX)'(cX))^{-1}(cX)'y \\
&= \frac{c}{c^2}(X'X)^{-1}X'y \\
&= \frac{1}{c}(X'X)^{-1}X'y \\
&= \frac{1}{c}\hat{\beta}^{X}_{OLS}
\end{aligned}
$$

Consequencias: Ridge no es invariante a las escala

- Entonces

$$\hat{\beta}^{Z}_{OLS}Z = \frac{1}{c}\hat{\beta}^{X}_{OLS}cX$$
$$= \hat{\beta}^{X}_{OLS}X$$

- Con Ridge esto no funciona

$$\hat{\beta}^{Z}_{Ridge}Z \neq \hat{\beta}^{X}_{Ridge}X$$

- Es importante estandarizar las variables (la mayoría de los softwares lo hace automáticamente)

Recap