Regularización: Lasso e Intro a Datos Espaciales

Big Data y Machine Learning para Economía Aplicada

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

Agenda

Agenda

Regularización: Motivación

- Las técnicas econometricas estándar no están optimizadas para la predicción porque se enfocan en la insesgadez.
- OLS por ejemplo es el mejor estimador lineal *insesgado*
- OLS minimiza el error *"dentro de muestra"*, eligiendo β de forma tal que

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

- pero para predicción, no estamos interesados en hacer un buen trabajo dentro de muestra
- Queremos hacer un buen trabajo, **fuera de muestra**

Ridge

- Asegurar cero sesgo dentro de muestra crea problemas fuera de muestra: trade-off Sesgo-Varianza
- Las técnicas de machine learning fueron desarrolladas para hacer este trade-off de forma empírica.
- Vamos a proponer modelos del estilo

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

- donde R es un regularizador que penaliza funciones que crean varianza
- Explícitamente en la minimización incluimos un termino de sesgo y un termino de varianza.

Ridge

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

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p}(\beta_j)^2 \tag{3}$$

Agenda

Lasso

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

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \tag{4}$$

Lasso

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

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \tag{4}$$

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

Lasso Intuición en 1 Dimension

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

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

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

- y la solución es

$$\hat{\beta}_{OLS} \tag{7}$$

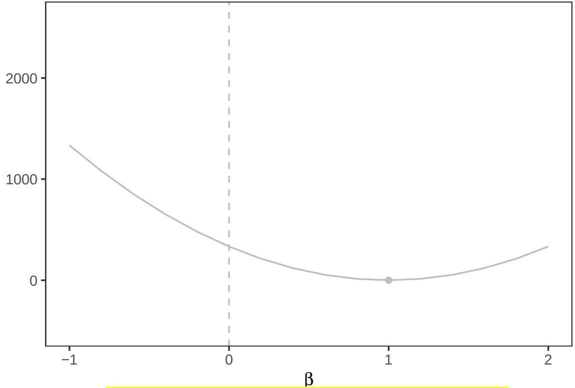
Intuición en 1 Dimension

$$min_\beta E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta| \tag{8}$$

Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

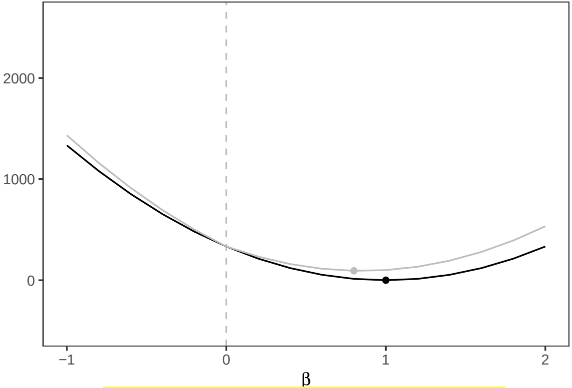
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{9}$$



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

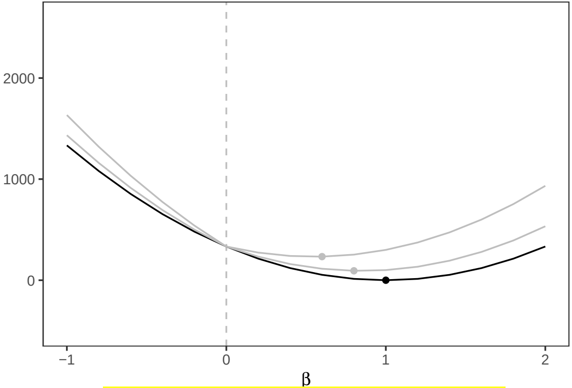
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{10}$$



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

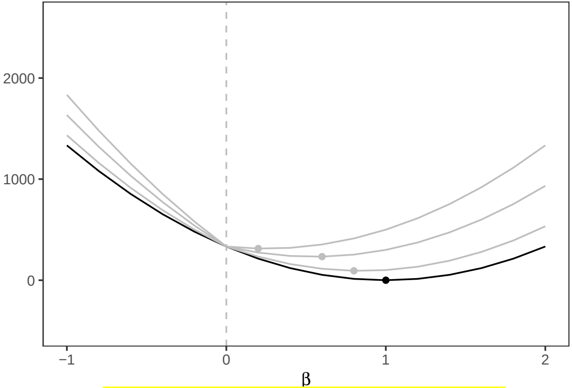
$$min_\beta E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{11}$$



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

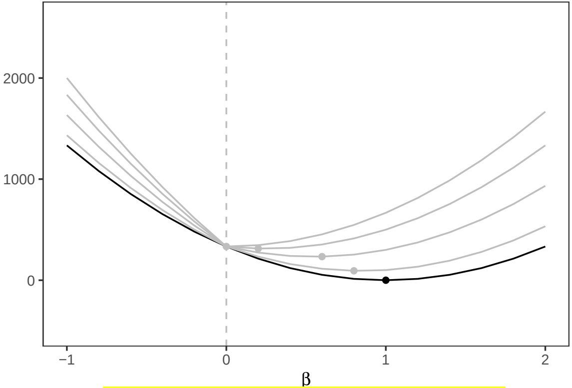
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{12}$$



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

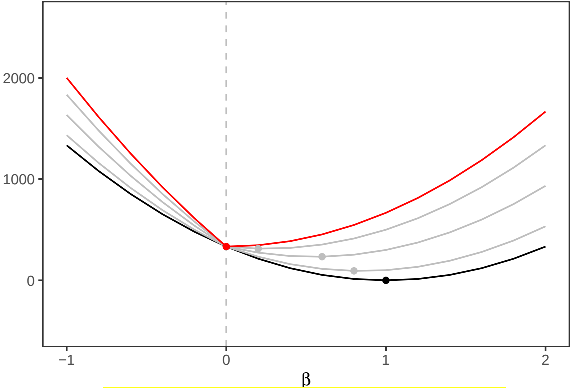
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{13}$$



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

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



Intuición en 1 Dimensión

$\hat{\beta} > 0$

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

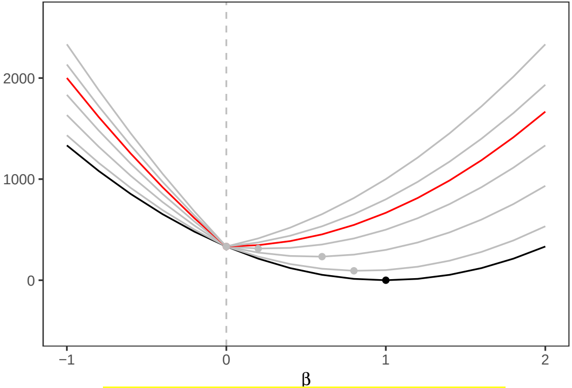


Ilustración en R

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

Intuición en 1 Dimension

Solución analitica

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

Intuición en 1 Dimension

Solución analitica

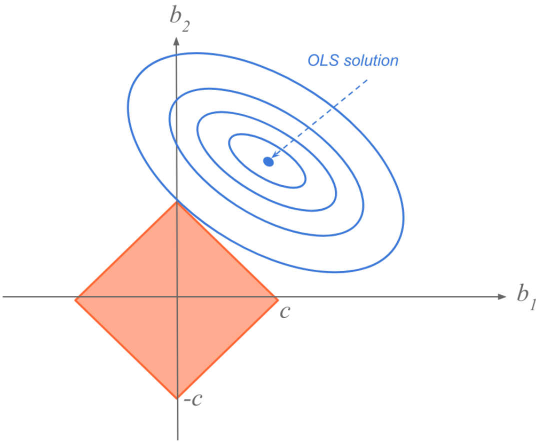
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta| \tag{16}$$

- la solución analítica es

$$\hat{\beta}_{lasso} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda \geq \lambda^* \\ \hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda}{2} & \text{si } \lambda < \lambda^* \end{cases} \tag{17}$$

Intuición en 2 Dimensiones (Lasso)

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } (|\beta_1| + |\beta_2|) \leq c \quad (18)$$



Example

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

Resumen

- Ridge y Lasso 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
  - Como elegimos λ?

Resumen

- Ridge y Lasso 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
  - Como elegimos λ? $\rightarrow$ Validación cruzada

Agenda

Family of penalized regressions

$$min_{\beta} R(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i'\beta)^2 + \lambda \sum_{s=2}^{p} |\beta_s|^p \tag{19}$$

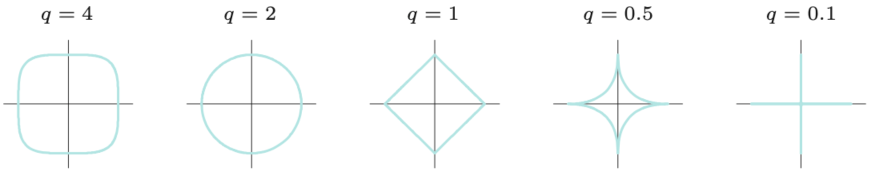


FIGURE 3.12. *Contours of constant value of* $\sum_j |\beta_j|^q$ *for given values of* q.

Agenda

More predictors than observations ($k > n$)

- Objective 1: Accuracy
  - Minimize prediction error (in one step) $\rightarrow$ Ridge, Lasso
- Objective 2: Dimensionality
  - Reduce the predictor space $\rightarrow$ Lasso's free lunch
- What happens when we have more predictors than observations ($k > n$)?
  - OLS fails
  - Ridge augments data
  - and Lasso?

Lasso when $k > n$

- Lasso works fine in this case
- However, there are some issues to keep in mind
  - When $k > n$ chooses at most n variables
  - When we have a group of highly correlated variables,
    - Lasso chooses only one. Makes it unstable for prediction. (Doesn't happen to Ridge)
    - Ridge shrinks the coefficients of correlated variables toward each other. This makes Ridge "work" better than Lasso. "Work" in terms of prediction error

Agenda

Elastic net

$$min_{\beta} EN(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \left(\alpha \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| + \frac{(1-\alpha)}{2} \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2 \right) \tag{20}$$

- Si $\alpha = 1$ Lasso
- Si $\alpha = 0$ Ridge

Elastic Net

- Elastic net: happy medium.
  - Good job at prediction and selecting variables

$$min_{\beta}EN(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda\left(\alpha\sum_{j=1}^{p}|\beta_j| + \frac{(1-\alpha)}{2}\sum_{j=1}^{p}(\beta_j)^2\right) \tag{21}$$

- Mixes Ridge and Lasso
- Lasso selects predictors
- Strict convexity part of the penalty (ridge) solves the grouping instability problem
- How to choose (λ, α)? $\rightarrow$ Bidimensional Crossvalidation
- Recomended lecture: Zou, H. & Hastie, T. (2005)
- H.W.: $\beta_{OLS} > 0$ one predictor standarized

$$\hat{\beta}_{EN} = \frac{\left(\hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda_1}{2}\right)_+}{1+\lambda_2} \tag{22}$$

Example

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