Lecture 3: Regularizacion y Clasificacion

Aprendizaje y Minería de Datos para los Negocios

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de los Andes

October 25, 2021

Agenda

1. Recap
   - Predicción
   - Overfit
2. Regularización
   - Lasso
   - Ridge
3. Classification
   - K vecinos cercanos (KNN)
   - Logit
4. Break
5. `R para ML`

Predicción y Error Predictivo

- El objetivo es predecir y dadas otras variables X.
- Asumimos que el link entre y and X esta dado por el modelo:

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

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

Predicción y Error Predictivo

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

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

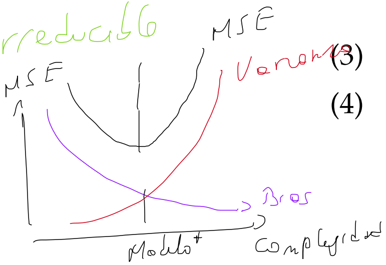
- Notemos que podemos descomponer el MSE en dos partes

$y = f(x) + u$

$$MSE(y) = MSE(\hat{f}) + \sigma^2 \tag{3}$$

irreducible

$$= Bias^2(\hat{f}) + V(\hat{f}) + \sigma^2 \tag{4}$$



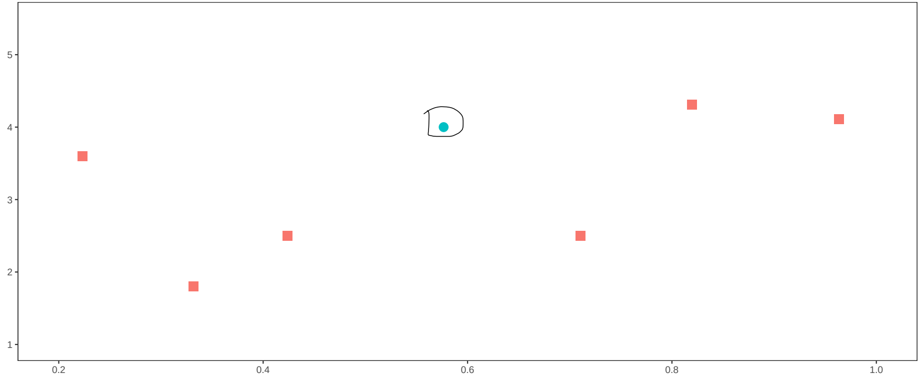
- el error de estimar f con $\hat{f}$. (*reducible*)
- el error de no observar u, σ^2. (*irreducible*)
- dilema entre sesgo y varianza

Overfit y Predicción fuera de Muestra

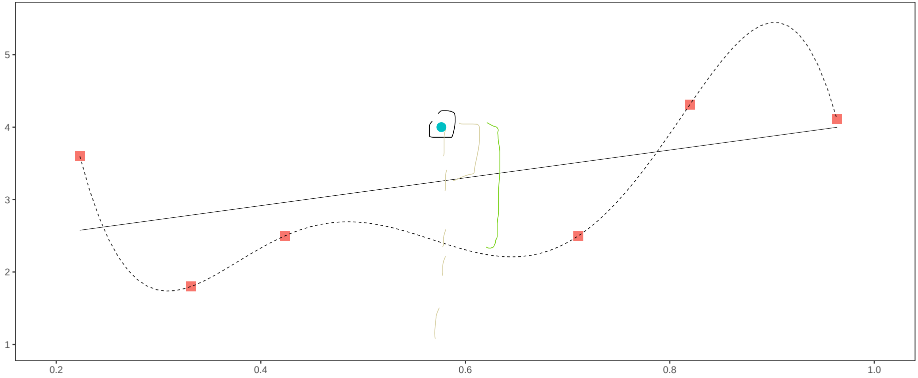
- ML nos interesa la predicción fuera de muestra
- Overfit: modelos complejos predicen muy bien dentro de muestra, pero tienden a hacer un trabajo fuera de muestra

  mal

Overfit



Overfit



Overfit y Predicción fuera de Muestra

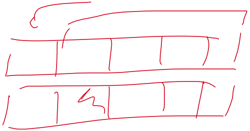
- ML nos interesa la predicción fuera de muestra
- Overfit: modelos complejos predicen muy bien dentro de muestra, pero tienden a hacer un trabajo fuera de muestra
- Hay que elegir el modelo que "mejor" prediga
  - Medidas Clásicas

$$AIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2\right) + p_j \tag{5}$$

BIC /

$$SIC(j) = log\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2\right) + p_j\frac{1}{2}log(n) \tag{6}$$

  - Métodos de Remuestreo
    - Validación cruzada en K-partes (5 o 10)
    - Usar el MSE



MSE_k

Regularización

Lasso

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

$$min_{\beta} E(\beta) = \underbrace{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2}_{} + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \tag{7}$$

$$\sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum |\beta_j| \quad |\beta_j - 0|$$

Lasso

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

$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| \tag{7}$$

  - "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
  - $E(\beta)$ es no differentiable

Lasso Intuición en 1 Dimension

- Lasso Intuición

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

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

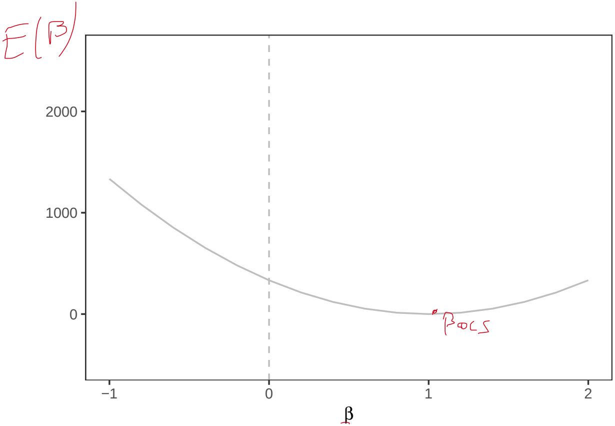
$$min_\beta E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_i\beta)^2 \tag{9}$$

- y la solución es

$$\hat{\beta}_{OLS} \tag{10}$$

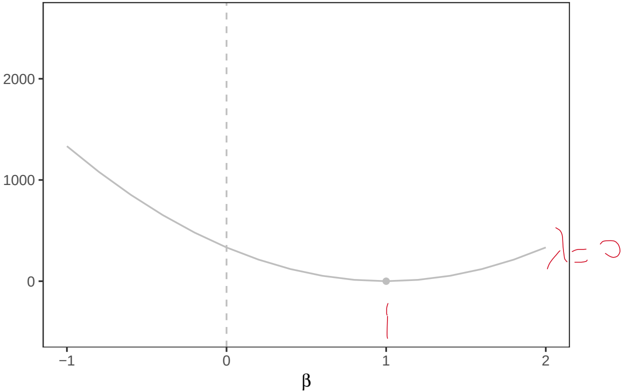
Intuición en 1 Dimension

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



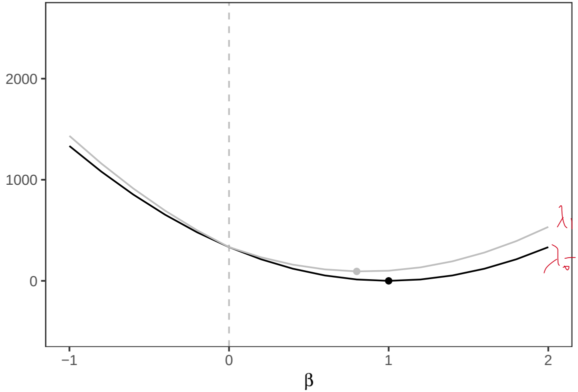
Intuición en 1 Dimension

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



Intuición en 1 Dimension

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

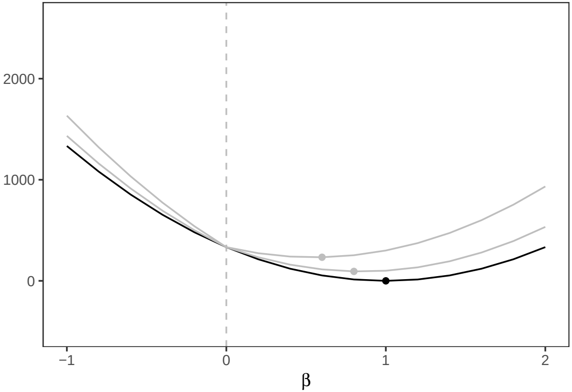


λ

$\lambda_0 = 0 \rightarrow \hat{\beta}_{OLS}$

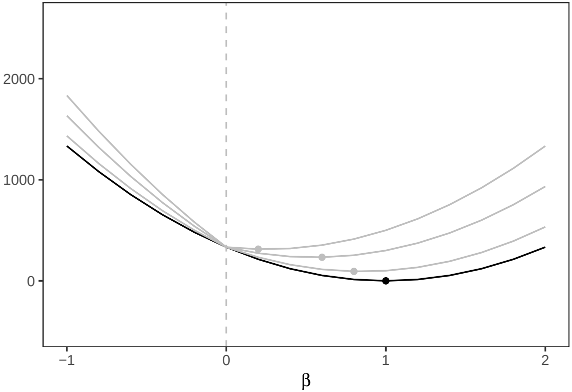
Intuición en 1 Dimension

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



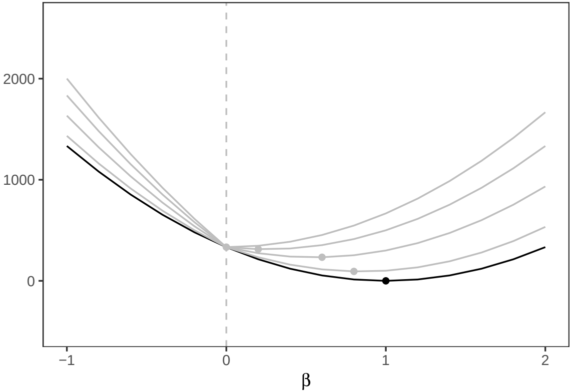
Intuición en 1 Dimension

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



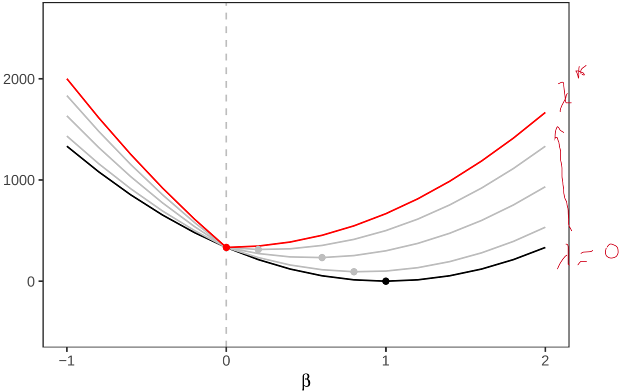
Intuición en 1 Dimension

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



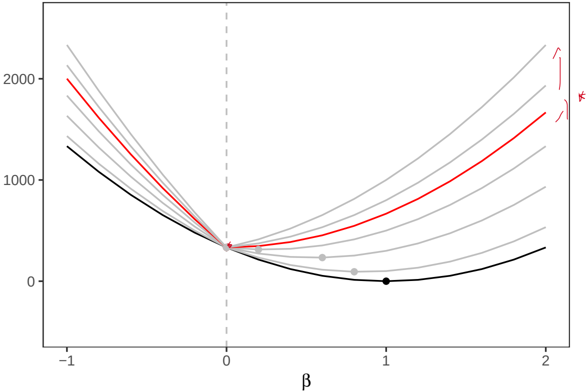
Intuición en 1 Dimension

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



Intuición en 1 Dimension

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



Intuición en 1 Dimension

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta| \tag{19}$$

la solución analítica es

$$\hat{\beta}_{lasso} = \begin{cases} \boxed{0} & \text{si } \lambda \geq \lambda^* \\ \hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda}{2} & \text{si } \lambda < \lambda^* \end{cases} \tag{20}$$

$0 \leq \lambda < \lambda^*$

Ridge

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

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

Lasso $|\beta_j|$

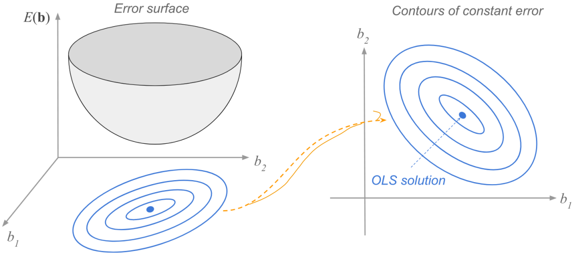
Ridge $(\beta_j - 0)^2$

$(\beta_j)^p$

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

Intuición en 2 Dimensiones (OLS)

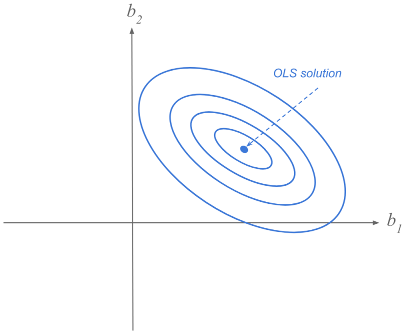
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \tag{22}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Intuición en 2 Dimensiones (OLS)

$$min_\beta E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \tag{23}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Intuición en 2 Dimensiones (Ridge)

- Al problema

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \cdots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}(\beta_j)^2 \tag{24}$$

- podemos escribirlo como

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \tag{25}$$

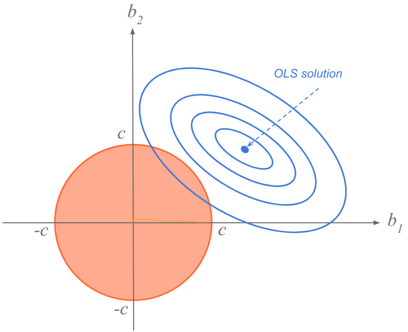
sujeto a

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

$c = \frac{1}{\lambda}$

Intuición en 2 Dimensiones (Ridge)

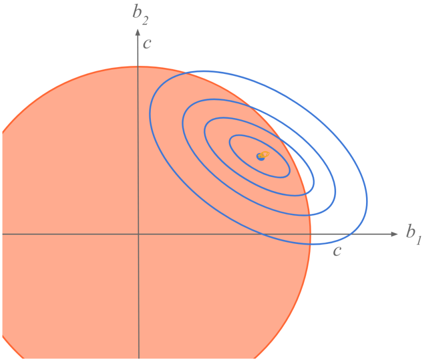
$$min_{\beta} E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{26}$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Intuición en 2 Dimensiones (Ridge)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{27}$$

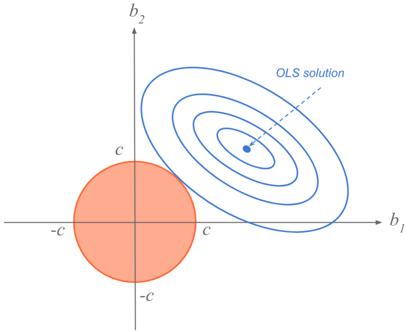


$c = \frac{1}{\lambda}$

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

Intuición en 2 Dimensiones (Ridge)

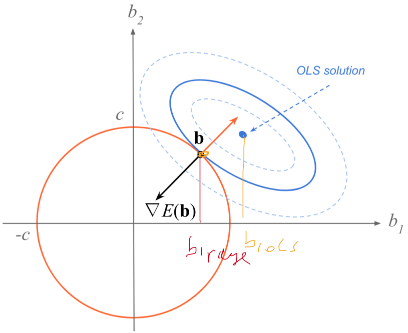
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \quad (28)$$



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Intuición en 2 Dimensiones (Ridge)

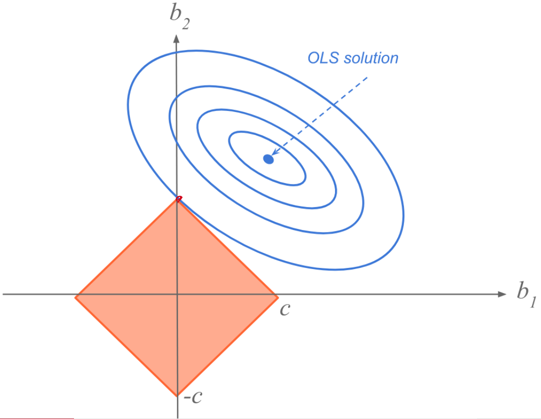
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } \left((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2\right) \leq c \tag{29}$$



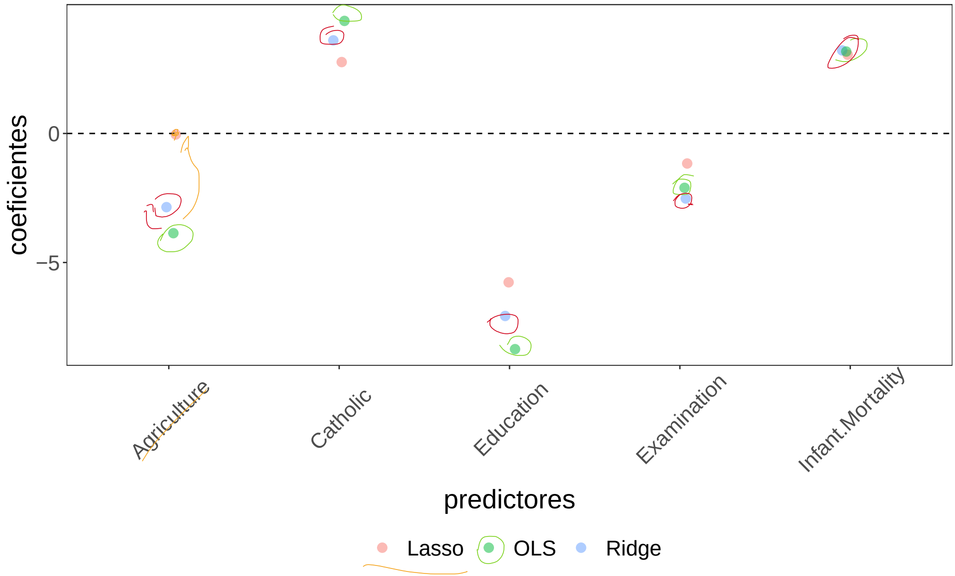
Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

Intuición en 2 Dimensiones (Lasso)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n}(y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } (|\beta_1| + |\beta_2|) \leq c \tag{30}$$



Lasso y Ridge Ejemplo



Comentarios técnicos

$$\hat{\beta}_{lasso} = \hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda}{2} \qquad \lambda \in (0, \lambda^*)$$

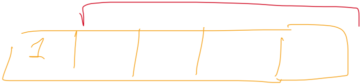
- Lasso y ridge son sesgados, pero las disminuciones en varianza pueden compensar estoy y llevar a un MSE menor

$$\hat{\beta}_{ridge} = \frac{\hat{\beta}_{OLS}}{1+\lambda}$$

- Lasso encoje a cero, Ridge no tanto
- Importante para aplicación:
  - Estandarizar los datos (media 0, y varianza 1)
  - Como elegimos λ?

Comentarios técnicos: selección de λ

- Como elegimos λ?
- λ es un parámetro y lo elegimos usando validación cruzada
  1. Partimos la muestra de entrenamiento en K Partes: $M_{train} = M_{fold\,1} \cup M_{fold\,2} \cdots \cup M_{fold\,K}$
  2. Cada conjunto $M_{fold\,K}$ va a jugar el rol de una muestra de evaluación $M_{eval\,k}$. Entonces para cada muestra
     - $M_{train-1} = M_{train} - M_{fold\,1}$
     - $\vdots$
     - $M_{train-k} = M_{train} - M_{fold\,k}$



  3. Luego hacemos el siguiente loop
     1. Para $\lambda_i = 0, 0.001, 0.002, \ldots, \lambda_{max}$
        - Para $k = 1, \ldots, K$
          - Ajustar el modelo $m_{i,k}$ con λ_i en $M_{train-k}$
          - Calcular y guardar el $MSE(m_{i,k})$ usando M_{eval-k}
        - fin para k
        - Calcular y guardar $MSE_i = \frac{1}{K} MSE(m_{i,k})$
     2. fin para λ
  4. Encontrar el menor MSE_i y usar ese $\lambda_i = \lambda^*$

Classification

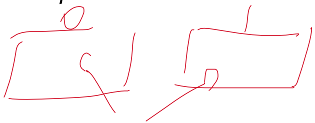
Classification: Motivation

- Muchas de las preguntas predictivas suelen ser de clasificación

Classification: Motivation

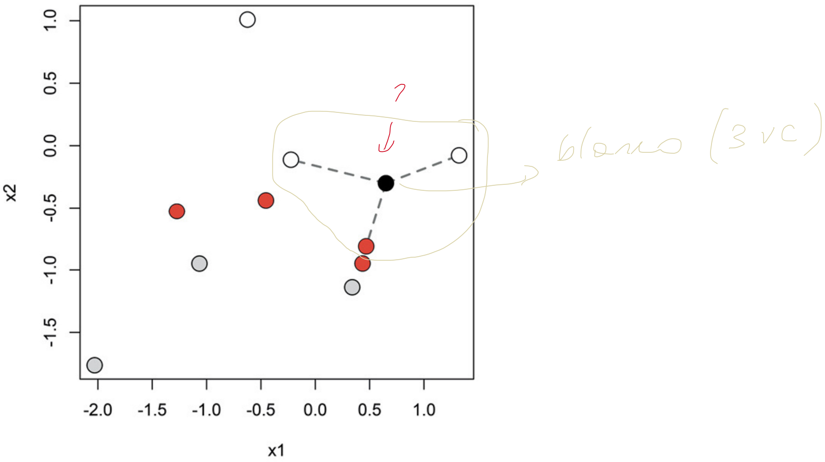
- Muchas de las preguntas predictivas suelen ser de clasificación
- Predecir si un usuario va a hacer click o no
- Decidir si alguien va a "default" el credito
- La afiliación política basado en los discursos
- La diferencia es que ahora y representa la pertenencia a una clase
- $y \in \{0, 1, \ldots, m\}$

  La pregunta es: dado un nuevo conjunto de predictores X ¿Cuál *es nuestra mejor predicción de la categoría a la que pertenece* ?



K vecinos cercanos (KNN)

- K vecinos cercanos predice la clase $\hat{y}$ a partir de x preguntandose *¿Cuál es la clase mas común para la observarción alrededor x?*



Source: Taddy (2019)

K vecinos cercanos (KNN)

- K vecinos cercanos predice la clase $\hat{y}$ a partir de x preguntandose *Cual es la clase mas común para la observarción alrededor x?*
- Algoritmo: dado el insumo x_f donde nos gustaría la clase:
  - Encontrar los K vecnos mas cercanos, donde cercanos lo definimos a partir de una distancia, la más común es la euclideana

$$d(x_i, x_f) = \sqrt{\sum_{j=1}^{p} (x_{ij} - x_{fj})^2} \tag{31}$$

  - Esto nos da los K vecinos cercanos:

$$[x_{i1}, y_{i1}], \ldots, [x_{iK}, y_{iK}] \tag{32}$$

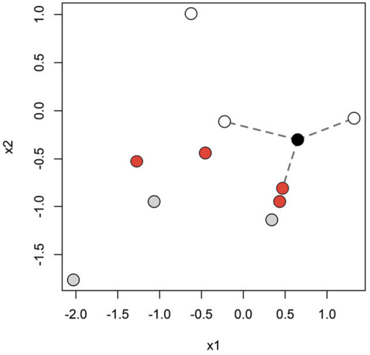
  - La clase predicha es la más común

$$\hat{y}_f = mode\{y_{i1}, \ldots, y_{iK}\} \tag{33}$$

K vecinos cercanos (KNN)

- Hay algunos problemas en aplicaciones
  - Las predicciones son inestables como función de K

$$K = 1 \implies \hat{p}(white) = 0$$
$$K = 2 \implies \hat{p}(white) = 1/2$$
$$K = 3 \implies \hat{p}(white) = 2/3$$
$$K = 4 \implies \hat{p}(white) = 1/2$$



Source: Taddy (2019)

K vecinos cercanos (KNN)

- Hay algunos problemas en aplicaciones
  - Las predicciones son inestables como función de K
  - Esto hace que sea muy dificil elegir el K óptimo y validación cruzada no funciona muy bien
  - Dado que cada predicción x requiere un proceso de cuenta computacionalmente muy costoso, KNN no es muy útil cuando trabajamos con Big Data
  - KNN es una buena idea, pero demasiado crudo para ser útil en la práctica

Probabilidades, Costos, y Clasificación

Probabilidades, Costos, y Clasificación

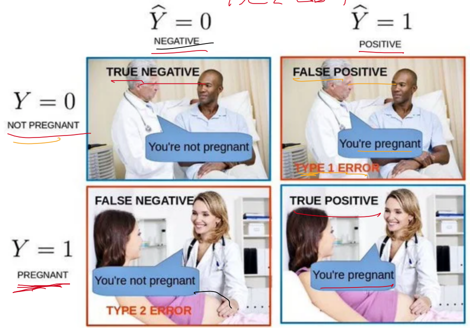
- Dos estados de la naturaleza $y \rightarrow n \in \{0, 1\}$

dato cola

- Dos acciones $(\hat{y}) \rightarrow a \in \{0, 1\}$
- Los aciertos y errores que cometemos al clasificar podemos resumirlos en

Acción

Naturaleza



Source: https://dzone.com/articles/understanding-the-confusion-matrix

Probabilidades, Costos, y Clasificación

- Dos estados de la naturaleza $y \to n \in \{0,1\}$
- Dos acciones ($\hat{y}$) $\to a \in \{0,1\}$
- ~~Probabilities~~ Probabilidades
  - $p = Pr(y = 1|X)$
  - $\underbrace{1 - p}_{} = Pr(y = 0|X)$
- Las acciones tienen costos
- y estas puede haber distintos costos asociados

Probabilidades, Costos, y Clasificación

- Para tomar una decisión optima, necesitamos estimar las probabilidades de los resultados posibles
- Estas probabilidades son las que permiten evaluar la perdida esperada
- La perdida esperada por tomar la accion a es

a = 100 prestamos { yo no 25

→ 125 → devuelves

10% prob q' no default

$$E[Loss(a)] = \sum_n p_n L(a,n) \tag{34}$$

$= 100 \, (0,10) + 25 \, (0,90)$?

- Al conocer las probabilidades de los distintos resultados podemos evaluar la perdida esperada

Loss → (0,1)

Probabilidades, Costos, y Clasificación

- Afortunadamente sabemos como estimar probabilidades
  - K-vecinos cercanos
  - Modelo logístico
  - entre otras

Logit

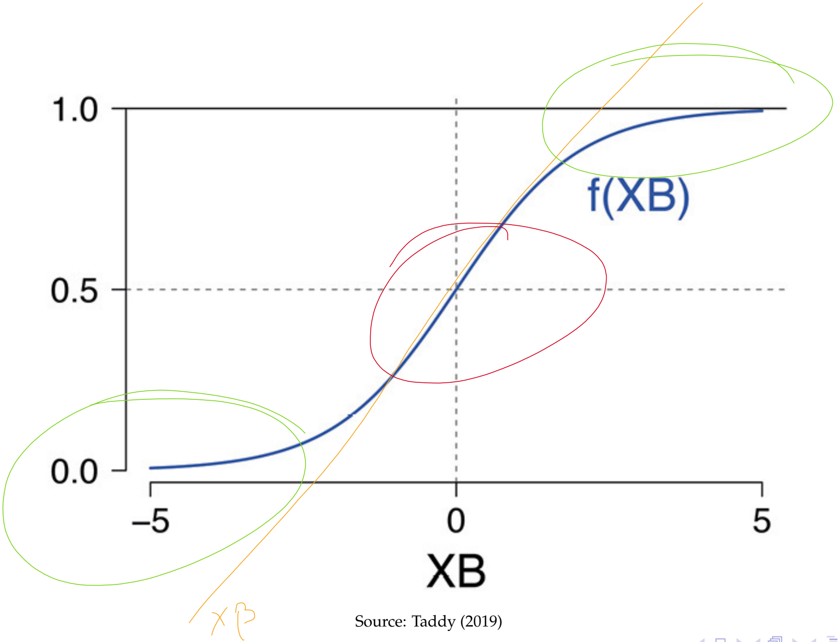
- Podemos modelar la relación entre $p(X)$ y X

$$Pr(y = 1|X) = f(X'\beta) \tag{35}$$

- usando la función logística (sigmoid, softmax)

$$p(y = 1|X) = \frac{e^{X'\beta}}{1 + e^{X'\beta}} = \frac{exp(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k)}{1 + exp(\beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_k x_k)} \tag{36}$$

Logit



Source: Taddy (2019)

Logit

- Tenemos la probabilidad condicional

$$Pr(y = 1|X) = f(X'\beta) \tag{37}$$

- Estimamos los parámetros usando MLE

- Podemos recobrar fácilmente las predicciones:

$$p(y = 1|X) = \frac{exp(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \cdots + \hat{\beta}_p x_p)}{1 + exp(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_1 + \cdots + \hat{\beta}_p x_p)} \tag{38}$$

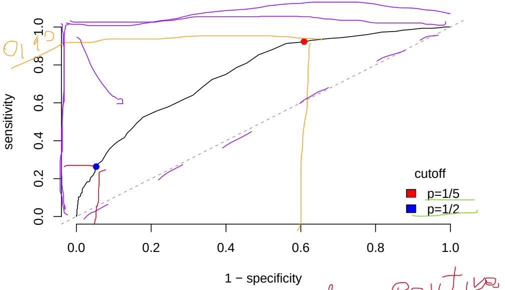
$P(y=1|x) \to 0{,}90 \quad 0{,}51\ ? \quad \boxed{\frac{1}{2}}$

$0{,}10$

ROC

- ROC ilustra el trade-off de las reglas de clasificación
- ROC nos da el *locus* de los *TPR* y *FPR* para todos los posibles $c \in [0, 1]$
  - *Sensibilidad:* Tasas de Verdaderos Positivos
  - *1-Especificidad:* Tasa de Falsos Positivos
- Nos da la habilidad
  - Medir la capacidad predictiva del modelo
  -

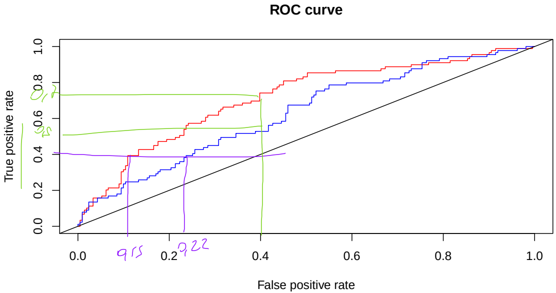
T
V
P

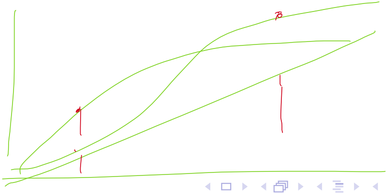


Tasa Falsos Positivos

ROC

- ROC ilustra el trade-off de las reglas de clasificación
- ROC nos da el *locus* de los *TPR* y *FPR* para todos los posibles $c \in [0,1]$
  - *Sensibilidad:* Tasas de Verdaderos Positivos
  - *1-Especificidad:* Tasa de Falsos Positivos
- Nos da la habilidad
  - Medir la capacidad predictiva del modelo
  - Comparar entre modelos

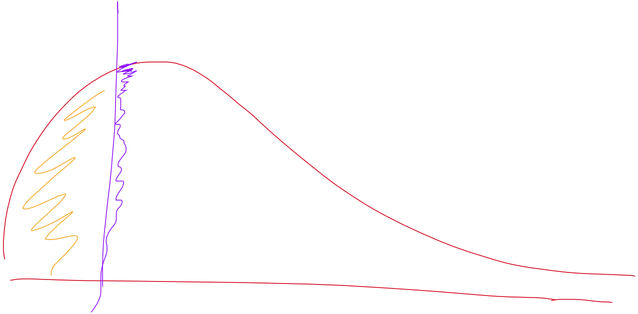




Revisión

Hoy

- Regularización
  - Lasso
  - Ridge
- Clasificación
  - Vecinos Cercanos
  - Logit
  - ROC



Volvemos en 5 mins con R

R para ML

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