Selección de Modelos y Regularización Machine Learning

Ignacio Sarmiento-Barbieri

Universidad de La Plata

Agenda

- 1 Recap: Predicción y Overfit
- 2 Selección de Modelos
- 3 Regularización
 - Recap: OLS Mechanics
 - Ridge
 - Escala de las variables
 - ullet Selección de λ
 - Ridge as Data Augmentation
 - Lasso
 - Ridge and Lasso: Pros and Cons
 - Familia de regresiones penalizadas
 - \bullet k > n
 - Elastic Net



Agenda

- 1 Recap: Predicción y Overfit
- 2 Selección de Modelos
- 3 Regularización
 - Recap: OLS Mechanics
 - Ridge
 - Escala de las variables
 - Selección de λ
 - Ridge as Data Augmentation
 - Lasso
 - Ridge and Lasso: Pros and Cons
 - Familia de regresiones penalizadas
 - \bullet k > n
 - Elastic Net



Recap: Predicción y Overfit

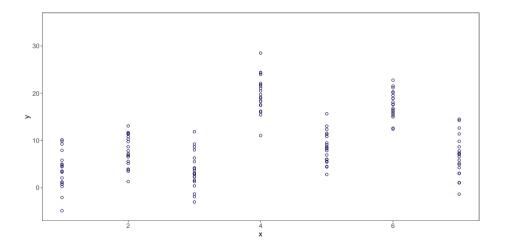
- ► Last Week:
 - ► Machine Learning is all about prediction
 - ▶ ML targets something different than causal inference, they can complement each other
 - ▶ Bias Variance trade-off: tolerating some bias is possible to reduce $V(\hat{f}(X))$ and lower MSE (ML best kept secret)
 - Overfit and Model Selecction
 - ► AIC y BIC
 - Validation Approach
 - ► LOOCV
 - ► K-fold Cross-Validation

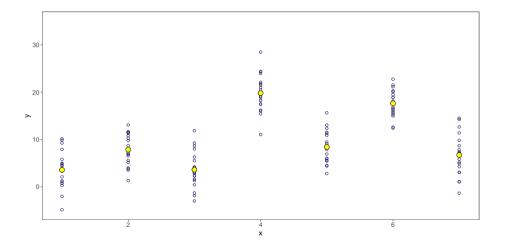
Recap: Train and Test Sets. In-Sample and Out-of-Sample Prediction.

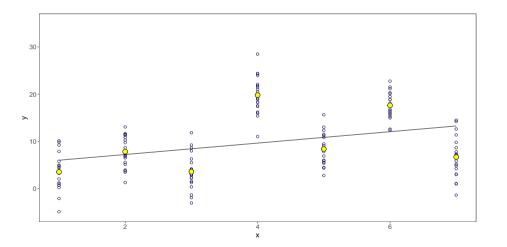
- ► El objetivo es predecir *y* dadas otras variables *X*. Ej: salario dadas las características del individuo
- ► Asumimos que el link entre *y* and *X* esta dado por el modelo:

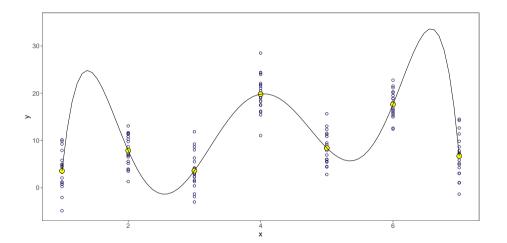
$$y = f(X) + u \tag{1}$$

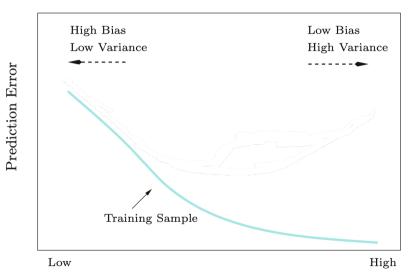
- ▶ donde f(X) por ejemplo es $\beta_0 + \beta_1 X_1 + \cdots + \beta_k X_k$
- u una variable aleatoria no observable E(u) = 0 and $V(u) = \sigma^2$



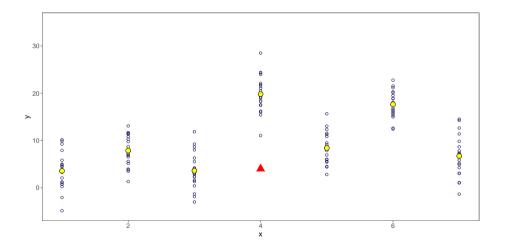


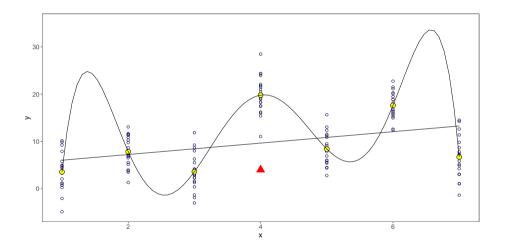




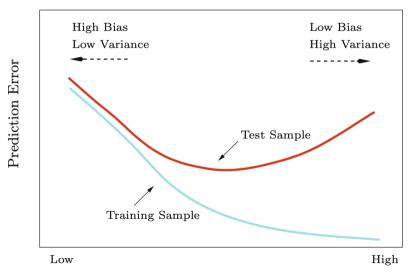


ML nos interesa la predicción fuera de muestra





Recap: Overfit y Predicción fuera de Muestra



Recap: 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)
 - Penalización ex-post: AIC, BIC, R2 ajustado, etc
 - Métodos de Remuestreo
 - Enfoque del conjunto de validación
 - ► LOOCV
 - ► Validación cruzada en K-partes (5 o 10)

Agenda

- 1 Recap: Predicción y Overfit
- 2 Selección de Modelos
- 3 Regularización
 - Recap: OLS Mechanics
 - Ridge
 - Escala de las variables
 - Selección de λ
 - Ridge as Data Augmentation
 - Lasso
 - Ridge and Lasso: Pros and Cons
 - Familia de regresiones penalizadas
 - \bullet k > n
 - Elastic Net



Model Subset Selection

- \blacktriangleright We have M_k models
- ▶ We want to find the model that best predicts out of sample
- ▶ We have a number of ways to go about it
 - Best Subset Selection
 - Stepwise Selection
 - ► Forward selection
 - Backward selection

Agenda

- Recap: Predicción y Overfit
- 2 Selección de Modelos
- 3 Regularización
 - Recap: OLS Mechanics
 - Ridge
 - Escala de las variables
 - Selección de //
 - Ridge as Data Augmentation
 - Lasso
 - Ridge and Lasso: Pros and Cons
 - Familia de regresiones penalizadas
 - \bullet k > n
 - Elastic Net



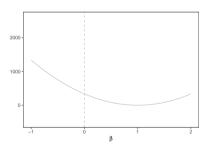
Regularización: Motivación

- 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

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

OLS 1 Dimension

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

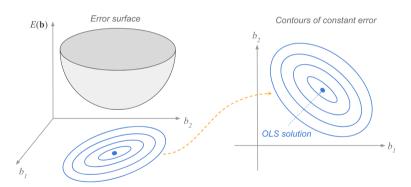


App



OLS 2 Dimensiones

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i2}\beta_2)^2$$
(4)



Fuente: https://allmodelsarewrong.github.io

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*
- ightharpoonup OLS minimiza el error "dentro de muestra", eligiendo β de forma tal que

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

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



Regularización

- ► 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

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} R(\beta_j)$$
 (5)

▶ donde *R* es un regularizador que penaliza funciones que crean varianza

Ridge

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

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

- ▶ 1 predictor estandarizado
- ► El problema:

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

La solución?



Problema como optimización restringida

Existe un $c \ge 0$ tal que $\hat{\beta}(\lambda)$ es la solución a

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2$$
sujeto a
$$(\beta)^2 < c$$
(8)

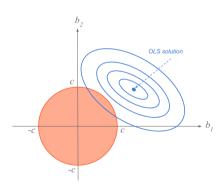
▶ Al problema en 2 dimensiones podemos escribirlo como

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i2}\beta_2 + \lambda (\beta_1^2 + \beta_2^2))$$
 (9)

podemos escribirlo como un problema de optimización restringido

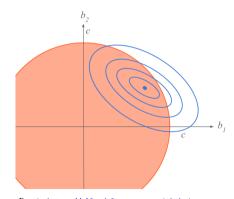
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2$$
sujeto a
$$((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) < c$$
(10)

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



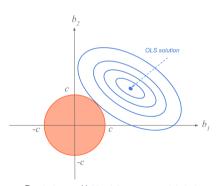


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (12)

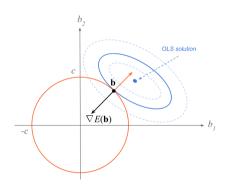




$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (13)



$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } ((\beta_1)^2 + (\beta_2)^2) \le c$$
 (14)





Términos generales

- ► En regresión multiple (X es una matriz $n \times k$)
- Regresión: $y = X\beta + u$
- ► OLS

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

► Ridge

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

Ridge vs OLS

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

Escala de las variables

- ▶ La escala de las variables importa en Ridge, mientras que en OLS no.
- ► Tiene consecuencias
 - ightharpoonup En la solución ($\hat{\beta}$)
 - ► En la predicción (ŷ)

Escala de las variables

Ridge no es invariante a las escala

- ▶ Supongamos z = c * x
- ► Vamos a mostrar que $\hat{y}_i^z = \hat{y}_i^x$
- ▶ Partamos del modelo

$$y_i = \beta_0^z + \beta_1^z z_i + u \tag{15}$$

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

Escala de las variables

Ridge no es invariante a las escala

Continuando

$$\hat{\beta}_1^z = \frac{\sum (z_i - \bar{z})(y_i - \bar{y})}{\sum (z_i - \bar{z})^2}$$
 (17)

ightharpoonup Pero z = c * x

$$\hat{\beta}_{1}^{z} = \frac{\sum (cx_{i} - c\bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum (cx_{i} - c\bar{x})^{2}}$$

$$= \frac{1}{c} \frac{\sum (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum (x_{i} - \bar{x})^{2}}$$

$$=\frac{1}{c}\hat{eta}_1^x$$

► En Ridge?

(18)

(19)

(20)

Ridge no es invariante a las escala

Continuando

$$\hat{\beta}_1^z = \frac{\sum (z_i - \bar{z})(y_i - \bar{y})}{\sum (z_i - \bar{z})^2}$$
 (17)

ightharpoonup Pero z = c * x

$$\hat{\beta}_{1}^{z} = \frac{\sum (cx_{i} - c\bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum (cx_{i} - c\bar{x})^{2}}$$

$$= \frac{1}{c} \frac{\sum (x_{i} - \bar{x})(y_{i} - \bar{y})}{\sum (x_{i} - \bar{x})^{2}}$$

$$= \frac{1}{c} \hat{\beta}_{1}^{x}$$

(19)

(18)

(20)

ightharpoonup En Ridge? ightharpoonup Ridge no es invariante a las escala

Ridge no es invariante a las escala

► En la predicción

$$\hat{\beta}_1^z z_i = \hat{\beta}_1^z c x_i \tag{21}$$

$$=\frac{1}{c}\hat{\beta}_1^x c x_i \tag{22}$$

$$=\hat{\beta}_1^x x_i \tag{23}$$

Ridge no es invariante a las escala

ightharpoonup En términos generales, si Z = cX

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

$$= ((cX)'(cX))^{-1}(cX)'y$$

$$= \frac{c}{c^{2}}(X'X)^{-1}X'y$$

$$= \frac{1}{c}(X'X)^{-1}X'y$$

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

Ridge no es invariante a las escala

▶ Entonces

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

Con Ridge esto no funciona

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

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





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

Selección de λ

- Asegurar cero sesgo dentro de muestra crea problemas fuera de muestra: trade-off Sesgo-Varianza
- Ridge hace este trade-off de forma empírica.

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

- $ightharpoonup \lambda$ es el precio al que hacemos este trade off
- Como elegimos λ?



Selección de λ

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

Selección de λ

- Luego hacemos el siguiente loop
 - Para $i = 0, 0.001, 0.002, \dots, \lambda_{max}$ {
 - Para k = 1, ..., 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 $MSE_i = \frac{1}{K}MSE(m_{i,k})$
 - $\}$ # fin para λ
- ► Encontramos el menor MSE_i y usar ese $\lambda_i = \lambda^*$





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

Ridge as Data Augmentation (1)

ightharpoonup Add λ additional points

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i \beta)^2 + \lambda \beta^2 = \tag{25}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i \beta)^2 + \sum_{j=1}^{\lambda} (0 - \beta)^2$$
 (26)

$$= \sum_{i=1}^{n+\lambda} (y_i - x_i \beta)^2$$
 (27)

RidgeDataAug



Ridge as Data Augmentation (2)

► Add a single point

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i \beta)^2 + \lambda \beta^2 =$$
(28)

$$= \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i \beta)^2 + (0 - \sqrt{\lambda} \beta)^2$$
 (29)

$$=\sum_{i=1}^{n+1}(y_i-x_i\beta)^2$$
(30)

RidgeDataAug



More predictors than observations (k > n)

- ▶ What happens when we have more predictors than observations (k > n)?
 - OLS fails
 - ► Ridge?

OLS when k > n

- ▶ Rank? Max number of rows or columns that are linearly independent
 - ▶ Implies $rank(X_{n \times k}) \le min(k, n)$
- ▶ MCO we need $rank(X_{n \times k}) = k \implies k \le n$
- ▶ If $rank(X_{n \times k}) = k$ then rank(X'X) = k
- ▶ If k > n, then $rank(X'X) \le n < k$ then (X'X) cannot be inverted
- ▶ Ridge works when $k \ge n$

Ridge when k > n

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \sum_{j=1}^{k} x'_{ij}\beta_j)^2 + \lambda (\sum_{j=1}^{k} \beta_j)^2$$
(31)

- ▶ Solution → data augmentation
- ► Intuition: Ridge "adds" *k* additional points.
- ▶ Allows us to "deal" with k > n

Lasso

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

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$
 (32)

Lasso

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

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - x_{i1}\beta_1 - \dots - x_{ip}\beta_p)^2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} |\beta_j|$$
 (32)

- 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
- $ightharpoonup L(\beta)$ es no differentiable



Lasso Intuición en 1 Dimension

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(33)

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

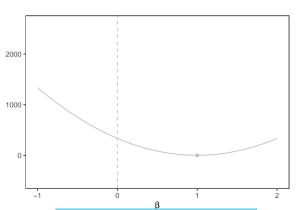
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2$$
(34)

y la solución es

$$\hat{\beta}_{OLS}$$
 (35)

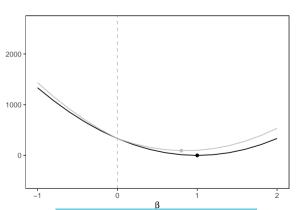
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(36)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta$$
(37)

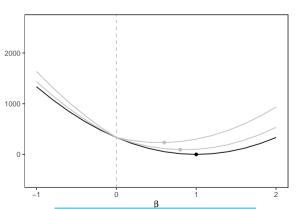


$$\hat{\beta} > 0$$

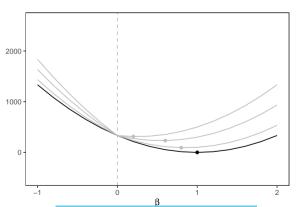
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta$$
(38)



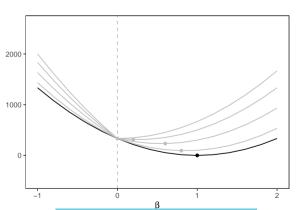
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta$$
(39)



$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{40}$$

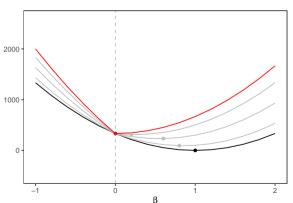


$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta$$
(41)



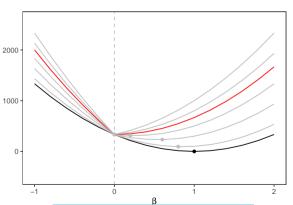
$$\hat{\beta} > 0$$

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{42}$$



$$\hat{\beta} > 0$$

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda\beta \tag{43}$$



Solución analitica

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(44)

Solución analitica

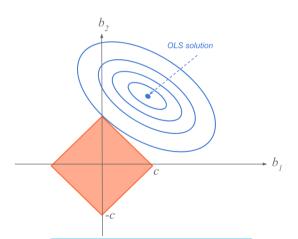
$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i\beta)^2 + \lambda|\beta|$$
(44)

la solución analítica es

$$\hat{\beta}_{lasso} = \begin{cases} 0 & \text{si } \lambda \ge \lambda^* \\ \hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda}{2} & \text{si } \lambda < \lambda^* \end{cases}$$
 (45)

Intuición en 2 Dimensiones (Lasso)

$$min_{\beta}E(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_{i1}\beta_1 - x_{i1}\beta_2)^2 \text{ s.a } (|\beta_1| + |\beta_2|) \le c$$
 (46)



Resumen

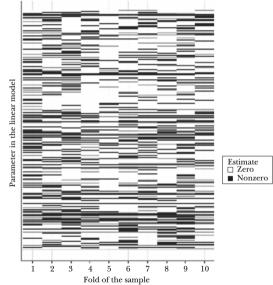
- ► Ridge y Lasso son sesgados, pero las disminuciones en varianza pueden compensar estoy y llevar a un MSE menor
- Lasso encoje a cero, Ridge no tanto
- ► Importante para aplicación:
 - Estandarizar los datos
 - ightharpoonup Como elegimos λ ?

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
 - ightharpoonup Como elegimos λ ? ightharpoonup Validación cruzada

- ► Objective 1: Accuracy
 - lacktriangle Minimize prediction error (in one step) ightarrow Ridge, Lasso
- Objective 2: Dimensionality
 - ▶ Reduce the predictor space → Lasso's free lunch
- ► More predictors than observations (k > n)
 - OLS fails
 - Ridge augments data
 - Lasso chooses at most *n* variables

- ▶ When we have a group of highly correlated variables,
 - Lasso chooses only one.



- ▶ When we have a group of highly correlated variables,
 - Lasso chooses only one. Makes it unstable for prediction.
 - ► Ridge shrinks the coefficients of correlated variables toward each other. This makes Ridge "work" better than Lasso. "Work" in terms of prediction error

Family of penalized regressions

$$min_{\beta}R(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - x_i'\beta)^2 + \lambda \sum_{s=2}^{p} |\beta_s|^p$$
(47)

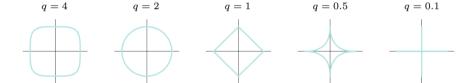


FIGURE 3.12. Contours of constant value of $\sum_{j} |\beta_{j}|^{q}$ for given values of q.

More predictors than observations (k > n)

- ► Objective 1: Accuracy
 - lacktriangle Minimize prediction error (in one step) ightarrow Ridge, Lasso
- ► Objective 2: Dimensionality
 - ▶ Reduce the predictor space → 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
 - ightharpoonup 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

Elastic net

$$min_{\beta}EN(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \left(\alpha \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| + \frac{(1-\alpha)}{2} \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2\right)$$
(48)

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

Elastic Net

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

$$min_{\beta}EN(\beta) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \sum_{j=1}^{p} x_{ij}\beta_j)^2 + \lambda \left(\alpha \sum_{j=1}^{p} |\beta_j| + \frac{(1-\alpha)}{2} \sum_{j=1}^{p} (\beta_j)^2\right)$$
(49)

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

$$\hat{\beta}_{EN} = \frac{\left(\hat{\beta}_{OLS} - \frac{\lambda_1}{2}\right)_+}{1 + \lambda_2} \tag{50}$$

