Makine Öğrenmesi

Tekrar Örnekleme ve Model Değerlendirme

İlker Birbil ve Utku Karaca

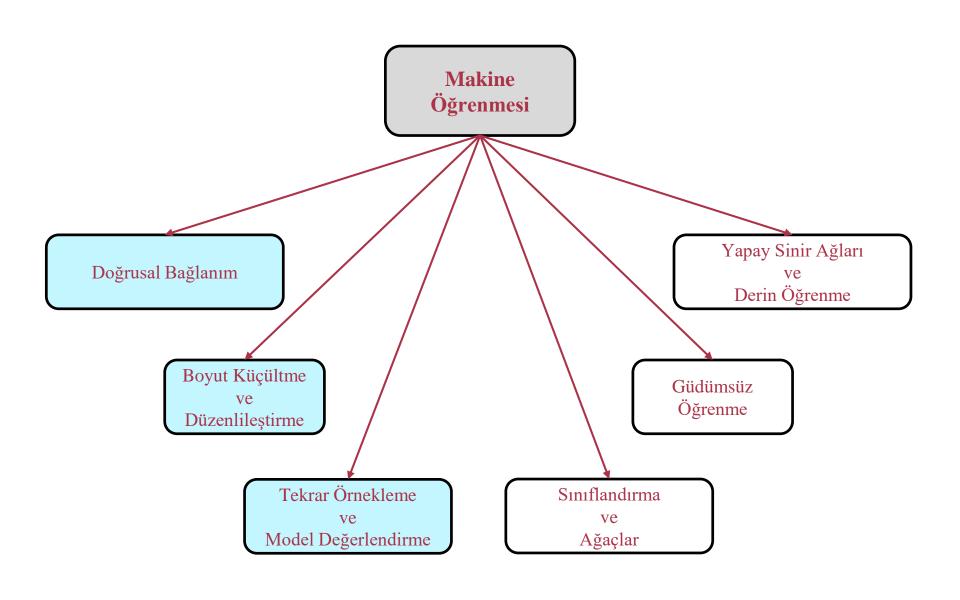
Erasmus Üniversitesi Rotterdam

İstanbul'da Makine Öğrenmesi

27 Ocak – 2 Şubat, 2020







Sıkça Sorulan Sorular

- Hangi tahminleyiciyi/sınıflandırıcıyı kullanmalıyız?
- Performans genellemesi nedir?
- Görülmemiş (gelecek) veri seti derken neyi kastediyoruz?
- Algoritmaların parametrelerini nasıl seçeriz?
- Birden fazla algoritmayı nasıl deneriz ve birbirleriyle kıyaslarız?
- Adil bir performans değerlendirmesi ve karşılaştırması nasıl olur?

Bu ders notlarında, Sebastian Ranschka'nın <u>çalışmasından</u>* pek çok fikir kullandım. Aynı zamanda, Python kodlarını yazarken de yine kendisinin <u>kodlarından</u> faydalandım.

*Model Evaluation, Model Selection, and Algorithm Selection in Machine Learning, S. Raschka, arXiv:1811.1280v2, 3 Aralık 2018.

Son Ürüne Doğru Adımlar (Steps to Delivery)

■ Performans Genellemesi (algoritma ve parametreleri belirlenmiş)

Örnek 1: *K*-En Yakın Komşu (sabit *K*)

Örnek 2: *m*. dereceden polinom kullanarak eğri uydurumu (sabit *m*)

■ Model Seçimi (algoritma belirlenmiş, 'en iyi' parametreler aranıyor)

Hiperparametreler: K=?, m=?, $\lambda=?$, $\alpha=?$, ...

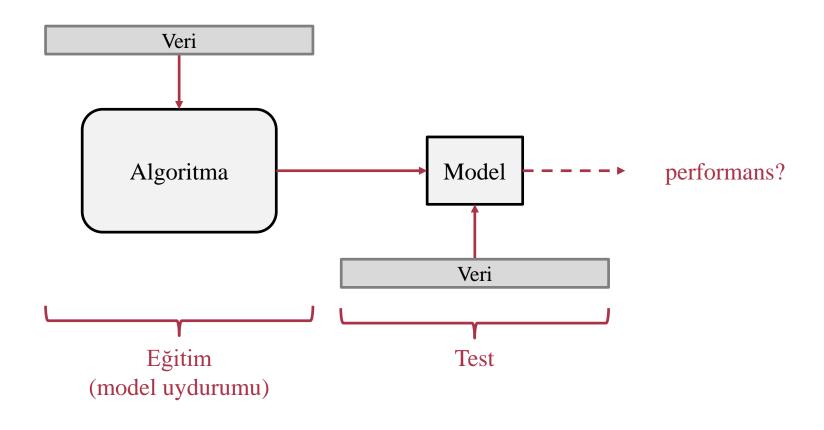
Farklı hiperparametreler (≠ model parametreleri), farklı modeller demek

Algoritma Seçimi

K-EYK?, eğri uydurumu?, lasso?, yapay sinir ağları?, ...

Performans Genellemesi

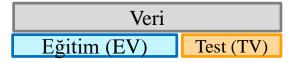
Tekrar Yerine Koyma (Resubstitution)

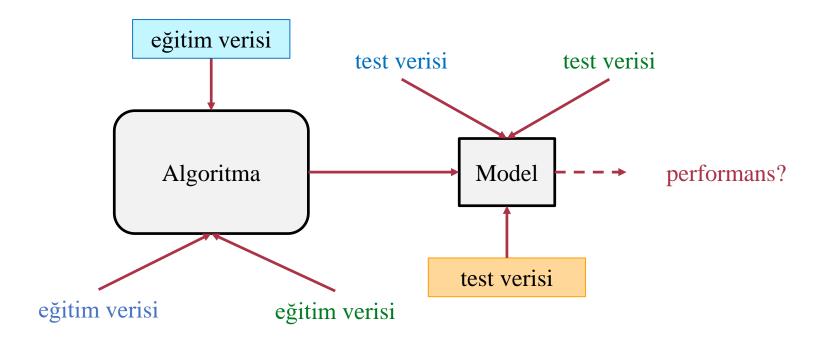


iyimser yanlılık
(optimistic bias)

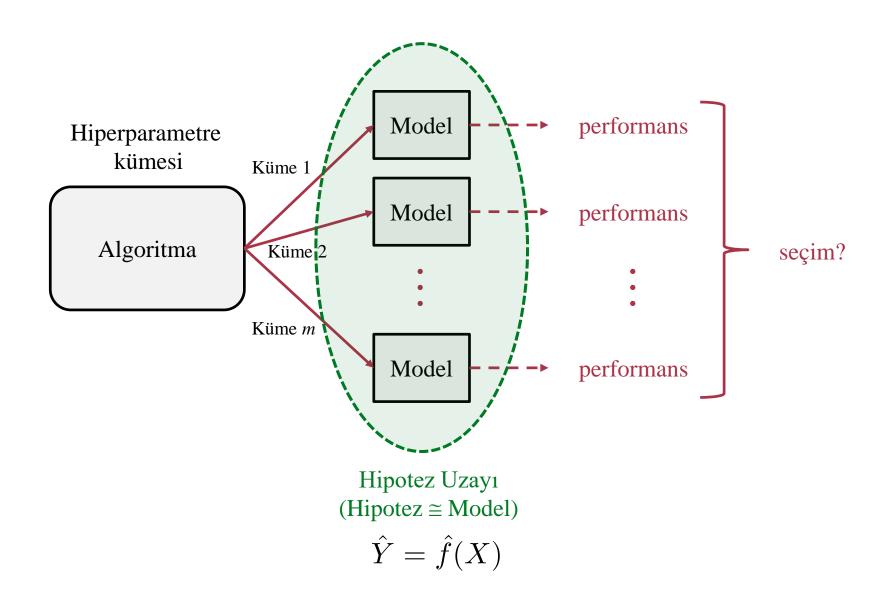
Performans Genellemesi

Ayırma (Holdout)

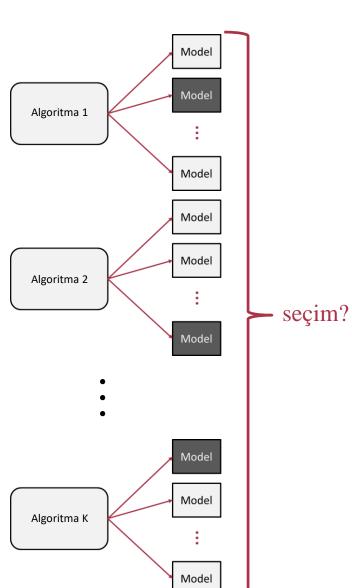




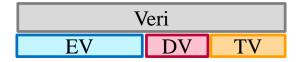
Model Seçimi



Algoritma Seçimi



■ Eğitim (EV) - Doğrulama (DV) - Test (TV)

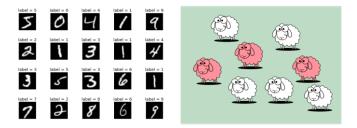


- İstatistiksel testler
- Tekrar örnekleme
 - Çapraz Geçerlilik Sınaması (Cross-validation)
 - Zorlama Tekniği (Boostrapping)
- Yanlılık Varyans ikilemi

Ayarlar ve Kurallar

 $\{(x_i,y_i):1,\ldots,n\}$

Bağımsız özdeşçe dağılmış veri ile sınıflandırma problemi



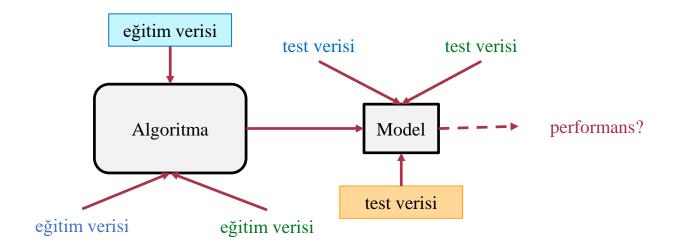
■ **Doğruluk:** Doğru sınıflandırılmış verilerin oranı

$$\delta = 1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} I(y_i \neq \hat{y}_i)$$

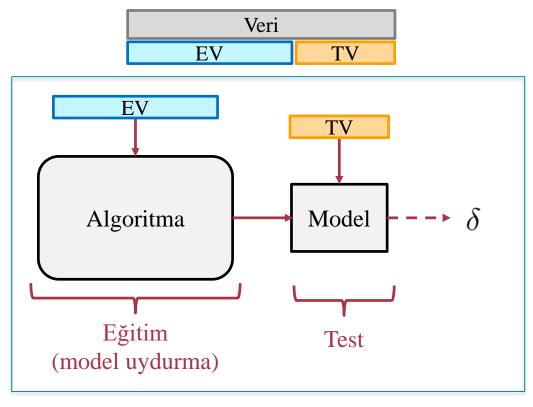
Yanlılığı önlemek için test setini sadece bir kere kullan

Performans Genellemesi

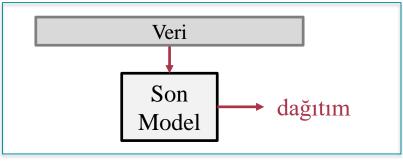
(algoritma ve parametreleri belirlenmiş)



Ayırma (Holdout)



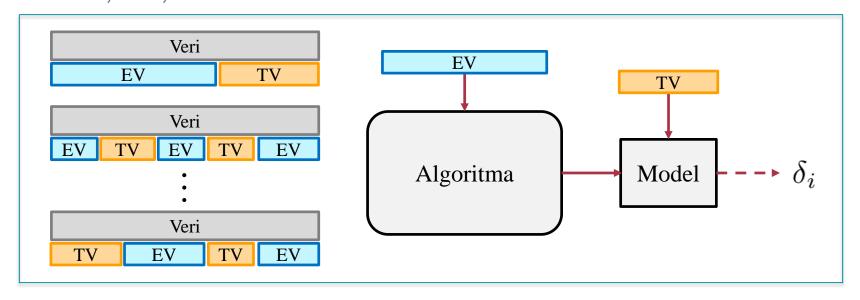
Son Eğitim



Verinin rastgele bölünmesinden dolayı ortaya çıkan belirsizlik?

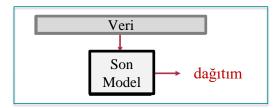
Tekrarlı Ayırma (Repeated Holdout)

$$i = 1, \ldots, k$$



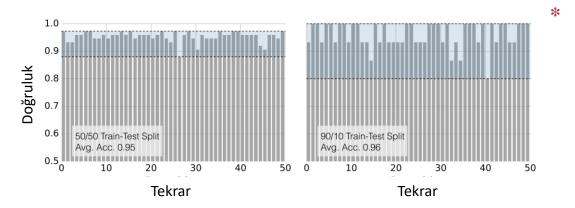
$$\delta = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \delta_i$$

Son eğitim



(Tekrarlı) Ayırma Üzerine Notlar

- Tek bölme: nokta tahmini (yüksek varyans)
- Tekrarlı bölmeler: ortalama tahmin (düşük varyans)
- 'Büyük Test Verisi Kötümser Yanlılık vs. Küçük Test Verisi Yüksek Varyans



- Katmanlama: Eğitim ve test verilerinde sınıf oranlarını koruma
- Diğer tekrar örnekleme yöntemleri: çapraz geçerlilik sınaması, zorlama tekniği (bootstrap)

^{*} Model Evaluation, Model Selection, and Algorithm Selection in Machine Learning, S. Raschka, arXiv:1811.1280v2, pg.15, 3 Dec 2018. (link)

Pratikte (ayırma (holdout))

```
import numpy as np
     from sklearn.datasets import load digits
                                                                           paketler ve fonksiyonlar
     from sklearn.model selection import train test split
     from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
     digits = load digits()
                                                                           MNIST verisinin yüklenmesi
     print(digits.data.shape)
     X, y = digits.data, digits.target
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                                                                           katmanlı veri ayrımı
                                                                           (eğitim: %70 - test: %30)
                                                     stratify=y)
15
     KNN classifier = KNeighborsClassifier(n neighbors=3,
                                weights='uniform',
                                algorithm='kd tree',
                                                                           tek algoritma (K-EYK)
                                                                           belirli hiperparametreler
                                metric='minkowski',
                                metric_params=None,
                                n jobs=1)
25
                                                                           model eğitilmesi
     KNN classifier.fit(X train, y train)
28 # Predict with the trained model
                                                                           model test edilmesi
     KNN y pred = KNN classifier.predict(X test)
30 # Evaluate the prediction accuracy
                                                                           performans değerlendirmesi
     KNN y pred acc = np.mean(y test == KNN y pred)
32
     print("Holdout prediction accuracy: ", KNN y pred acc)
                                                                           son model elde edilmesi
     KNN classifier.fit(X, y)
```

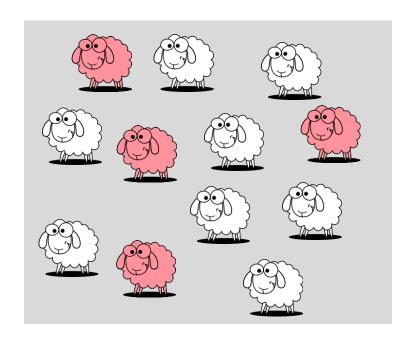
Pratikte (tekrarlı ayırma)

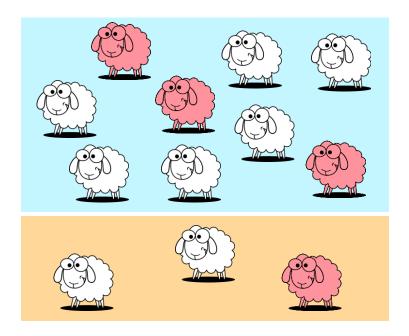
```
import numpy as np
     from sklearn.datasets import load digits
                                                                                           paket ve fonksiyonlar
    from sklearn.model_selection import train_test_split
     from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
                                                                                           MNIST verisinin yüklenmesi
    digits = load digits()
    X, y = digits.data, digits.target
    KNN_classifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors=3,
                                weights='uniform',
                                algorithm='kd tree',
                                                                                           tek algoritma (K-EYK)
                                                                                           belirlenmiş hiperparametreler
                                metric='minkowski',
                                metric params=None,
                                n jobs=1)
17
     rng = np.random.RandomState(seed=12345)
                                                                                            Tekrarlar için rastgele seed'ler
     seeds = np.arange(10**5); rng.shuffle(seeds); seeds = seeds[:50] # Select the first 50
20
    accuracies = []
    for i in seeds:
         X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
                                                                                            katmanlı veri ayrımı
                                                           test size=split ratio,
                                                                                            (eğitim: %70 - test: %30)
                                                           stratify=y)
         KNN classifier.fit(X train, y train)
                                                                                            her bir model eğitilip,
         KNN_y_pred_i_acc = KNN_classifier.score(X_test, y_test)
         accuracies.append(KNN y pred i acc)
                                                                                            test edilmesi
     accuracies = np.asarray(accuracies)
                                                                                            modellerin ortalama performansı
    print("Repeated holdout average prediction accuracy: ", accuracies.mean())
    # Final model trained on the entire data set (deployment)
                                                                                            son model elde edilmesi
     KNN classifier.fit(X, y)
    print('Resubstitution (optimistic) prediction accuracy: ', KNN classifier.score(X, y);
```

Tekrar Örnekleme

Katmanlama (Stratification)



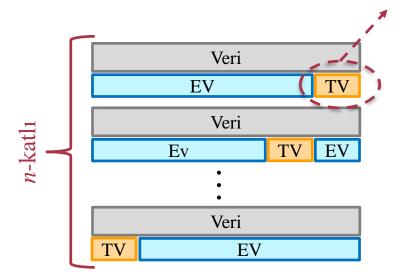




Tekrar Örnekleme

 $\{(x_i, y_i) : 1, \dots, n\}$

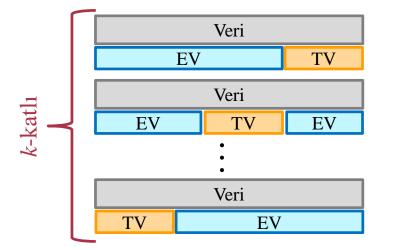




Tek satır veri

Biri-Hariç (Leave-One-Out) ÇGS

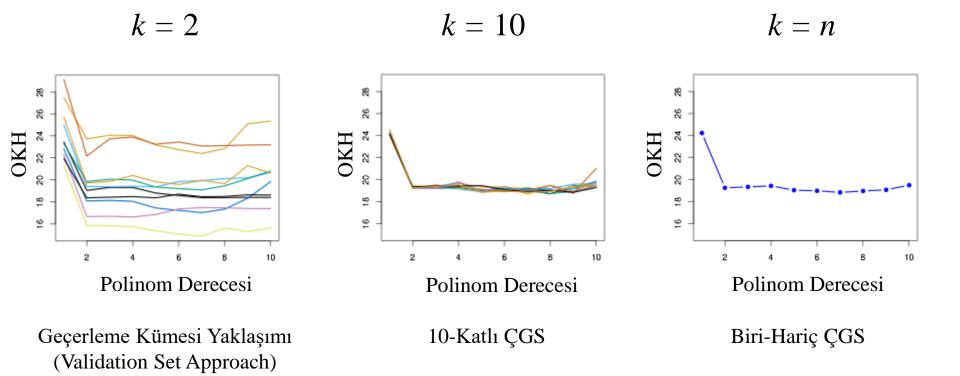
$$\delta = 1 - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} I(y_i \neq \hat{y}_i)$$



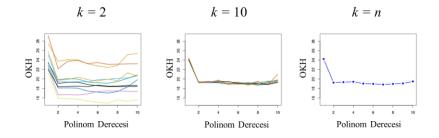
k-Katlı (k-Fold) ÇGS

$$\delta = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \delta_i$$

Genellikle ÇGS uygulamadan önce veri karıştırılır



Yanlılık-Varyans İkilemi



Test Hatası





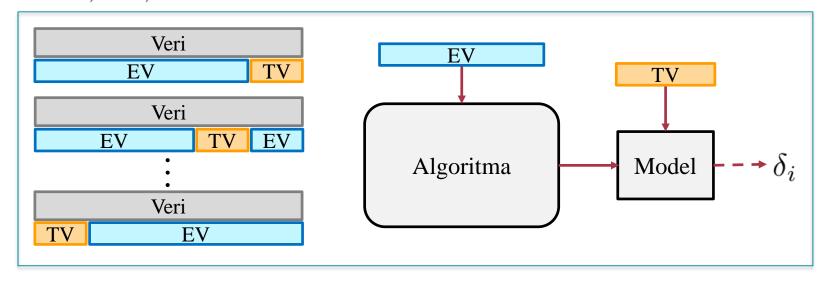
$$\left(\frac{k-1}{k}\right)n$$
: eğitim verisi boyutu

$$\delta = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \delta_i$$

$$Var(X + Y) = Var(X) + Var(Y) + 2Cov(X, Y)$$

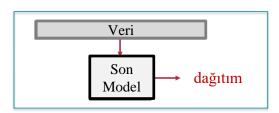
k-katlı Çapraz Geçerlilik Sınaması

$$i = 1, \ldots, k$$

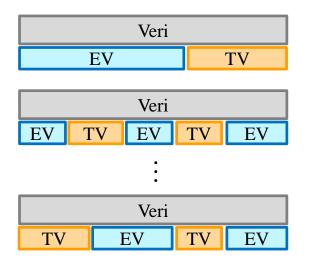


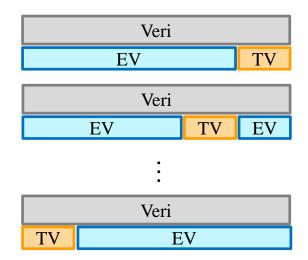
$$\delta = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} \delta_i$$



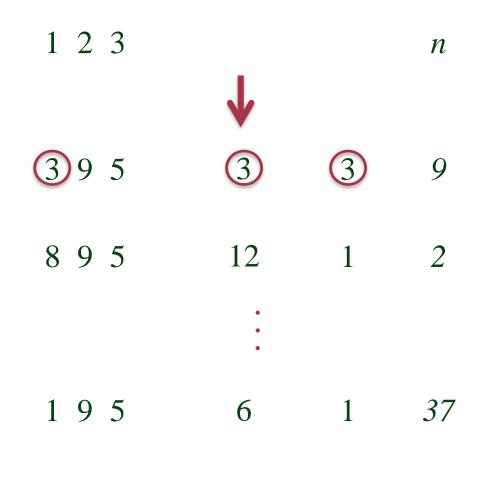


Tekrarlı Ayırma vs. k-katlı ÇGS





Zorlama Tekniği (Bootstrap)



- Yerine koyarak
- **eğitim** verisi sayısı genellikle *n*
- dışarıda kalanlar (out-ofbag) test verisi
- İstatistik toplama (örn., bağlanım parametrelerinin varyansları)
- veri az olduğunda tercih sebebi

Tekrar Örnekleme

İstatistikler

iyimser yanlılık



(resubstitution accuracy)

kötümser yanlılık

$$\delta^{\bullet} \pm t \sqrt{\frac{1}{b-1} \sum_{j=1}^{b} (\delta_{j}^{\bullet} - \delta^{\bullet})^{2}}$$
güven aralığı (normallik varsayımı altında)

doğruluğu

Örnek: $b = 100, t_{95} = 1.984$

Tekrar Örnekleme

.632 Tahmini (Estimate)

$$\mathbb{P}(\text{bir \"{o}rnek seçilmesi}) = 1 - \left(1 - \frac{1}{n}\right)^n \underset{n >> 0}{\approx} 0.632$$

$$\delta = \frac{1}{b} \sum_{j=1}^{b} (0.632 \ \delta_j^h + 0.368 \ \delta_j^r)$$
 biraz daha
$$= 0.632 \ \delta^h + 0.368 \ \delta^r$$
 iyimser yanlılık

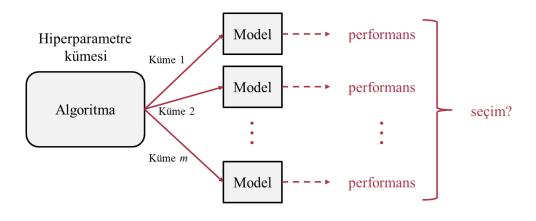
.632+ yöntemi (Efron and Tibshirani, 1997)

Pratikte (zorlama tekniği)

```
import numpy as np
    import seaborn as sns
                                                                            paketler ve fonksiyonlar
    from sklearn.datasets import load digits
    from sklearn.model_selection import train_test_split
    from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
    digits = load_digits()
                                                                           MNIST verisinin yüklenmesi
    X, y = digits.data, digits.target
    KNN classifier = KNeighborsClassifier(n neighbors=3,
                                weights='uniform',
                                algorithm='kd tree',
                                                                            tek algoritma (K-EYK)
                                                                            belirli hiperparametreler
                                metric params=None,
                                n_{jobs=1}
18
                                                                            zorlama tekniği için rastgele seed'ler
    rng = np.random.RandomState(seed=12345)
    idx = np.arange(y.shape[0])
    accuracies = []
    for i in range(200):
                                                                            yerine koyarak örnekleme(eğitim verisi)
        train_idx = rng.choice(idx, size=idx.shape[0], replace=True)
        test_idx = np.setdiff1d(idx, train_idx, assume_unique=False)
                                                                            kalanları test için işaretleme
        boot_train_X, boot_train_y = X[train_idx], y[train_idx]
        boot_test_X, boot_test_y = X[test_idx], y[test_idx]
        KNN classifier.fit(boot train X, boot train y)
                                                                            her bir model eğitilip, test edilmesi
        acc = KNN classifier.score(boot test X, boot test y)
        accuracies.append(acc)
                                                                           modellerin ortalama performansı
    mean = np.mean(accuracies)
    print("Bootstrap average prediction accuracy: ", mean)
    KNN_classifier.fit(X, y)
                                                                            son model elde edilmesi
```

Model Seçimi

(algoritma belirlenmiş, 'en iyi' parametreler aranıyor)



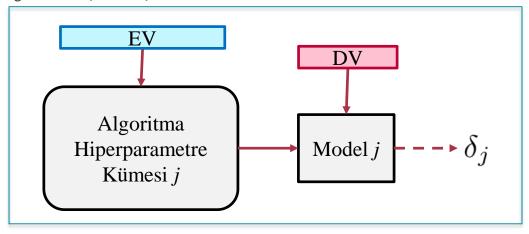
 $\begin{aligned} & \text{Hipotez Uzayı} \\ & (\text{Hipotez} \cong \text{Model}) \end{aligned}$

$$\hat{Y} = \hat{f}(X)$$

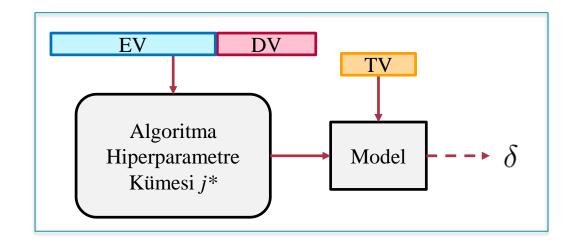
Üçlü Ayırma



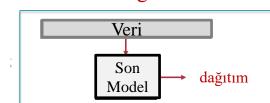
$$j = 1, \ldots, m$$



$$j^* = \arg\max\{\delta_j : j = 1, \dots, m\}$$



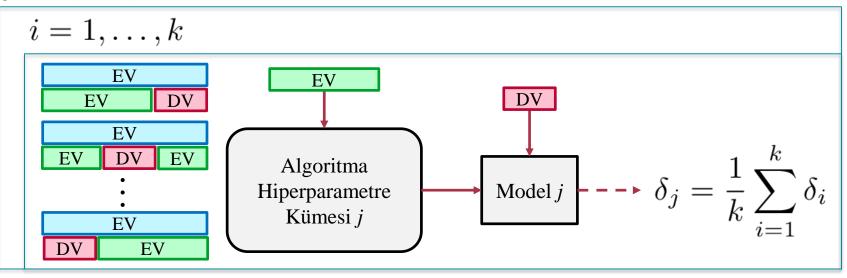
Son eğitim



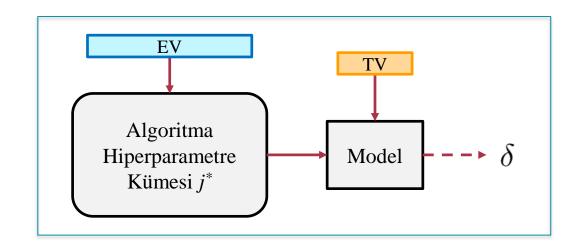
k-katlı ÇGS

$$j=1,\ldots,m$$





$$j^* = \arg\max\{\delta_j : j = 1, \dots, m\}$$



Son eğitim Veri Son Model dağıtım

Pratikte (k-katlı ÇGS)

```
sklearn.datasets import load_digits
     from sklearn.model_selection import train_test_split
    from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
         sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
    digits = load_digits()
    X, y = digits.data, digits.target
9 # Hyperparameter K = 1, 2, \ldots, 7
10 params = range(1, 8)
11   cv_acc, cv_std, cv_stderr = [], [], []
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
    # 10-fold stratified cross validation
    for c in params:
         KNN_classifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors=c,
                                  weights='uniform',
                                  metric='minkowski',
        all acc = []
         for train index, valid index in cv.split(X train, y train):
             pred = KNN_classifier.fit(X_train[train_index], y_train[train_index])\
                    .predict(X_train[valid_index])
             acc = np.mean(y_train[valid_index] == pred)
             all_acc.append(acc)
        all_acc = np.array(all_acc)
        y_pred_cv10_mean = all_acc.mean(); y_pred_cv10_std = all_acc.std()
        y pred cv10 stderr = y pred cv10 std / np.sqrt(10)
        cv acc.append(y pred cv10 mean); cv std.append(y pred cv10 std)
        cv_stderr.append(y_pred_cv10_stderr)
     best K = np.argmax(cv acc)
     KNN classifier = KNeighborsClassifier(n neighbors=params[best K],
                                           algorithm='kd_tree',
    KNN_classifier.fit(X_train, y_train)
    KNN_y_pred_acc = KNN_classifier.score(X_test, y_test)
50 print("K-fold prediction accuracy: ", KNN_y_pred_acc)
    KNN classifier.fit(X, y)
```

paketler ve fonksiyonlar

MNIST verisinin yüklenmesi hiperparametre aralığı

katmanlı veri ayrımı (%70 - %30)

10-katlı ÇGS hazırlığı

tek algoritma (*K*-EYK) farklı hiperparametreler

10-katlı ÇGS uygulaması

istatistikleri kaydetme

'en iyi' parametrelerle eğitme

performans değerlendirmesi

son modelin elde edilmesi

Pratikte (tekrarlı k-katlı ÇGS)

```
import numpy as np
    import matplotlib.pyplot as plt
    from sklearn.datasets import load_digits
    from sklearn.model selection import train test split
     from sklearn.model_selection import StratifiedKFold
    from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier
    digits = load_digits()
    X, y = digits.data, digits.target
9 # Hyperparameter K = 1, 2, \ldots, 7
    params = range(1, 8); cv_acc, cv_std, cv_stderr = [], [], []
11 params_by_seed = []
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(X, y,
     rng = np.random.RandomState(seed=12345); seeds = np.arange(10**5)
     rng.shuffle(seeds); seeds = seeds[:5] # Select the first
     for seed in seeds:
         cv = StratifiedKFold(n_splits=10, shuffle=True, random_state=seed)
         acc_by_param = []
22
         for c in params:
             KNN_classifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors=c,
                                                   weights='uniform',
                                                   algorithm='kd_tree',
31
             all acc = []
             for train index, valid index in cv.split(X train, y train):
                 pred = KNN_classifier.fit(X_train[train_index], y_train[train_index])\
                        .predict(X train[valid index])
                 acc = np.mean(y_train[valid_index] == pred)
                 all acc.append(acc)
             all acc = np.array(all acc)
             acc_by_param.append(all_acc.mean())
         params by seed.append(acc by param)
     best K = np.argmax(np.mean(params by seed, 0))
     KNN_classifier = KNeighborsClassifier(n_neighbors=params[best_K],
                                           weights='uniform',
                                           algorithm='kd_tree',
                                           metric='minkowski',
     KNN_classifier.fit(X_train, y_train)
     KNN_y_pred_acc = KNN_classifier.score(X_test, y_test)
    print("Repeated K-fold prediction accuracy: ", KNN_y_pred_acc)
     KNN_classifier.fit(X, y)
```

paketler ve fonksiyonlar

MNIST veri setinin yüklenmesi hiperparametrele aralığı katmanlı veri ayrımı (%70 - %30) tekrarlar için rastgele seed'ler farklı seed'ler ile 10-katlı ÇGS hazırlığı

tek algoritma (*K*-EYK) farklı hiperparametreler

10-katlı ÇGS uygulaması ve istatistiklerin kaydedilmesi

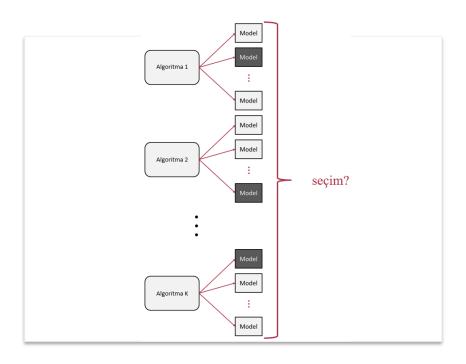
'en iyi' parametre ile eğitme

performans değerlendirmesi son modelin elde edilmesi

Model Seçimi Notları

- Etraflı performans genellemesi test setine bağlıdır
- k-katlı ÇGS büyük veriyle veya yavaş algoritmalarla çok zaman alır
- Veri büyük olduğunda üçlü ayırma yöntemi daha hızlıdır
- Ayırma yöntemi arasıra 2-katlı ÇGS olarak anılır (tam olarak doğru olmasa da)
- *k*-katlı ÇGS için genelgeçer bir *k* değeri yoktur (genellikle 5 veya 10)
- Kabaca: Biri-hariç ÇGS (küçük veri), k-katlı ÇGS ya da üçlü ayırma (büyük veri)

Algoritma Seçimi

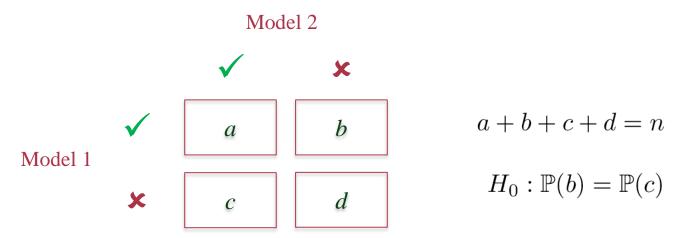


Model Kıyaslaması

- İki model kıyaslarken
 - z-puanlarına dayalı fark testleri
 - McNemar Testi
- İkiden fazla modeli kıyaslarken
 - Cochran Q Testi
 - F-testi
 - Bağımlı *t*-testi, birleştirilmiş *F*-testi
 - İç içe çapraz geçerlilik sınaması
- Ve dahası...

İki modeli kıyaslama

McNemar Testi

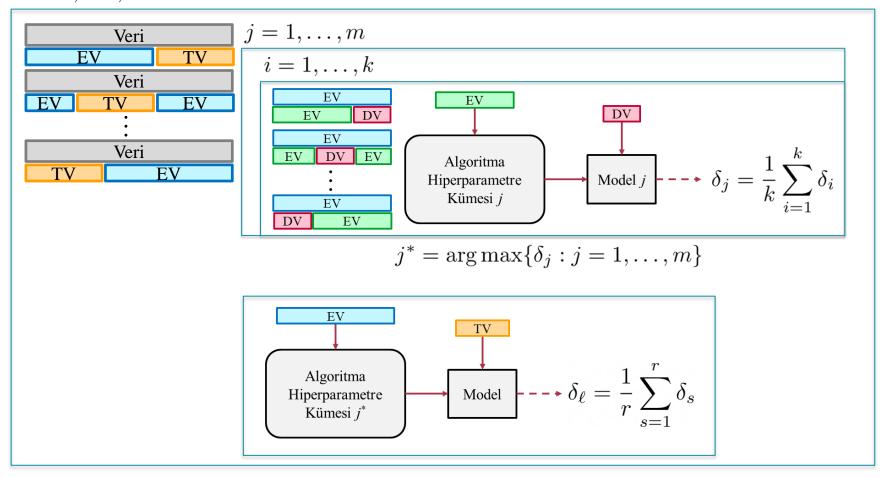


Test istatistiği :
$$\chi^2 = \frac{(|b-c|-1)^2}{b+c}$$

- 1. Anlamlılık düzeyi seçimi (e.g., 0.05)
- 2. Test: *p*-değeri değerlendirmesi
- 3. Sıfır hipotezini kabul etme ya da reddetme

İç içe k-katlı ÇGS (Nested k-fold CV)

$$s = 1, \ldots, r$$



 δ_{ℓ} : Algoritma $\ell = 1, ..., K$ performansı

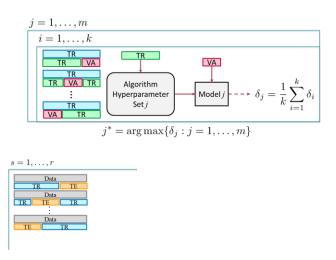
Daha sonra K algoritma arasından en iyi performans gösteren seçilir

Pratikte (iç içe k-katlı ÇGS)

```
clf1 = LogisticRegression(..)
clf2 = KNeighborsClassifier(...)
      param grid1 = [{'clf1 penalty': ['12'],
      'clf1_C': np.power(10., np.arange(-4, 4))}]
param_grid2 = [{'clf2_n_neighbors': list(range(1, 10)),
      param_grid3 = [{'max_depth': list(range(1, 10)) + [None],
                           'criterion': ['gini', 'entropy']}]
      param_grid4 = [{'clf4_kernel': ['rbf'],
                          'clf4_C': np.power(10., np.arange(-4, 4)),
'clf4_gamma': np.power(10., np.arange(-5, 0))},
      for pgrid, est, name in zip((param_grid1, param_grid2,
                                          param_grid3, param_grid4),
                                          (pipe1, pipe2, clf3, pipe4),
                                          ('Softmax', 'KNN', 'DTree', 'SVM')):
                                  param_grid=pgrid,
scoring='accuracy',
                                   verbose=0,
           gridcvs[name] = gcv
      for name, gs_est in sorted(gridcvs.items()):
           nested score = cross val score(gs est,
                                                  X=X train,
           print('%s | outer ACC %.2f%% +/- %.2f
      best_algo = gridcvs['SVM']
48 best_algo.fit(X train, y train)
     train_acc = accuracy_score(y_true=y_train, y_pred=best_algo.predict(X_train))
test_acc = accuracy_score(y_true=y_test, y_pred=best_algo.predict(X_test))
      best algo.fit(X, y)
```

aday algoritmalar

hiperparametre kümelerinin belirlenmesi

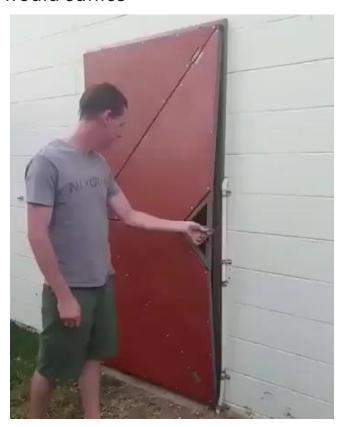


en iyi algoritmanın performansının belirlenmesi son modelin elde edilmesi ve...



Follow

When you use a 10 layer Deep Neural Network where Logistic Regression would suffice



Özet

- Performans genellemesi
- Model seçimi (hiperparametre ayarlaması (tuning))
- Ayırma yöntemleri
- Tekrar Örnekleme: zorlama yöntemi (bootstrapping), ÇGS
- Algoritma seçimi
- Fark testleri
- Diğer yöntemler