

Model Değerlendirme ve Geçerleme

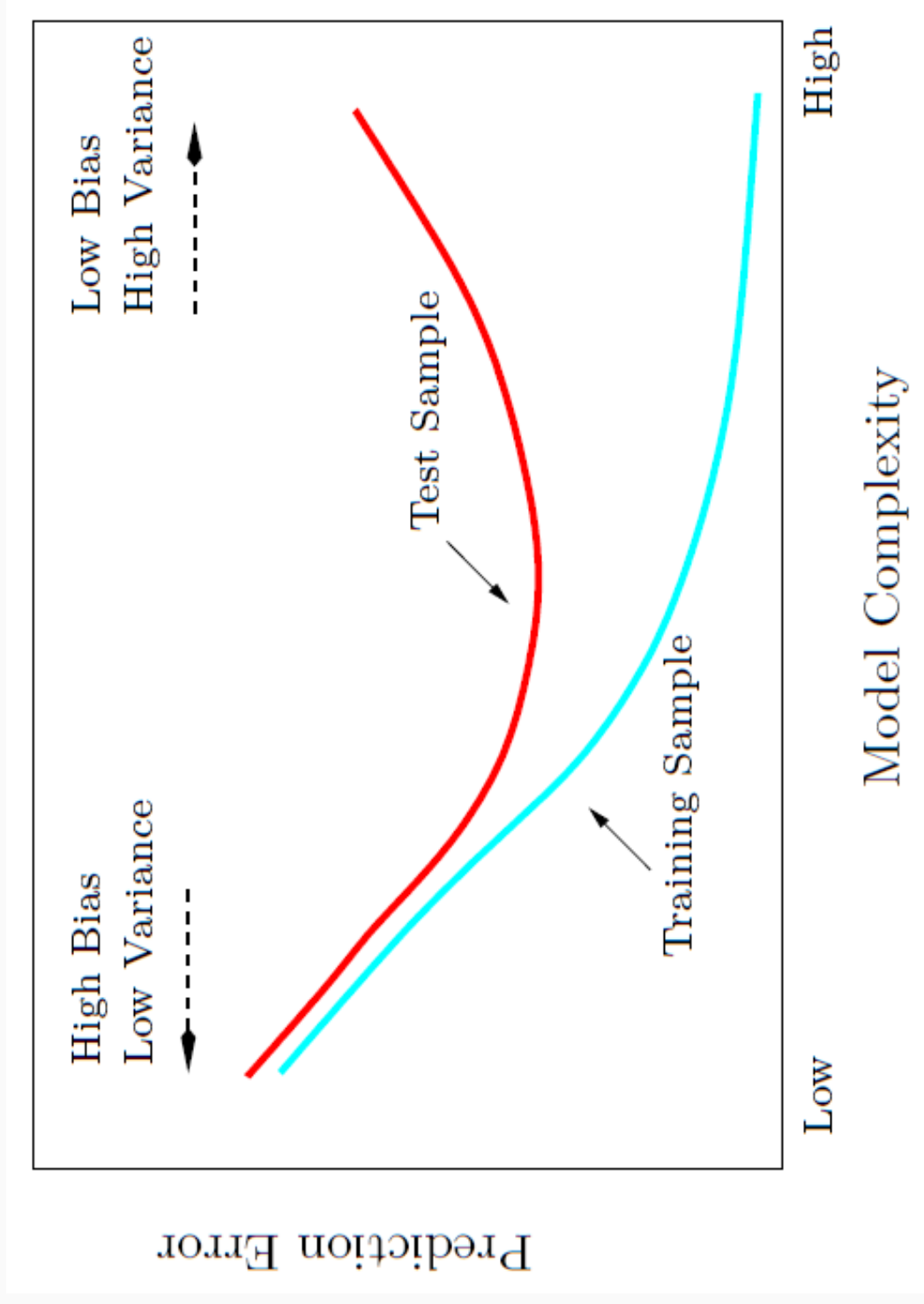
(İktisatçılar İçin) Makine Öğrenmesi (TEK-ES-2020)

Hüseyin Taştan
Yıldız Teknik Üniversitesi

Plan

- Test Hatasının Tahmini
- Geçerleme (Validation)
- Çapraz Geçerleme (Cross Validation)
- Biri-Hariç Çapraz Geçerleme
- k -Katlı Çapraz Geçerleme

Eğitim ve Test Hatası



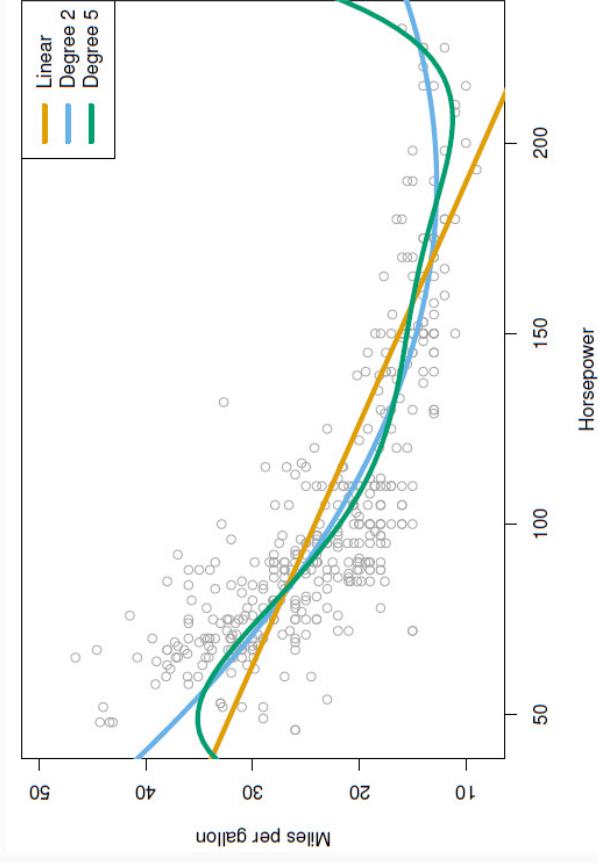
Örnek: Polinom regresyonu

Örnek olarak aşağıdaki polinom regresyonu düşünelim:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \dots + \beta_p x^p + \epsilon$$

(Dataset = AUTO, y=mpg (miles per gallon), x=horsepower)

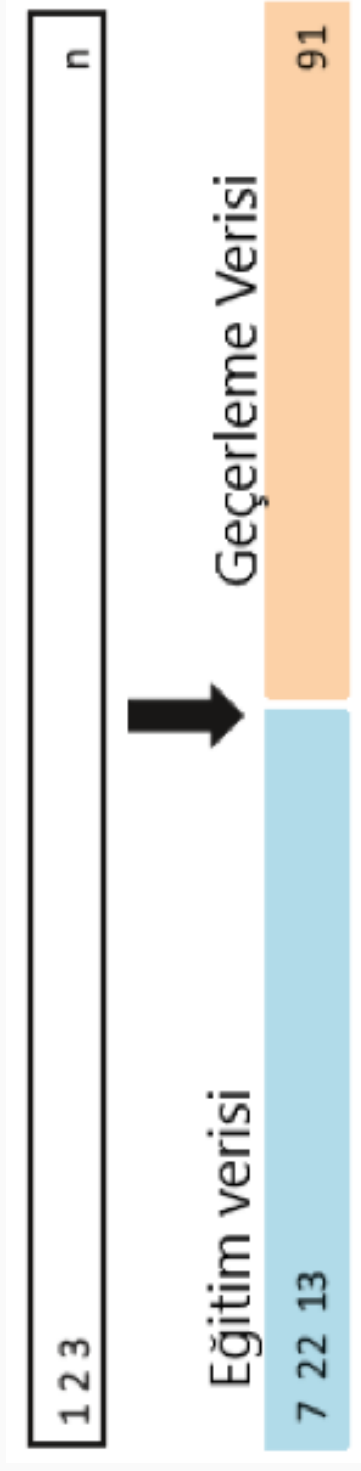
- En iyi kestirimleri veren (en küçük MSE değerine sahip) p (polinom derecesi) kaçtır?



Test Hatası Nasıl Hesaplanır?

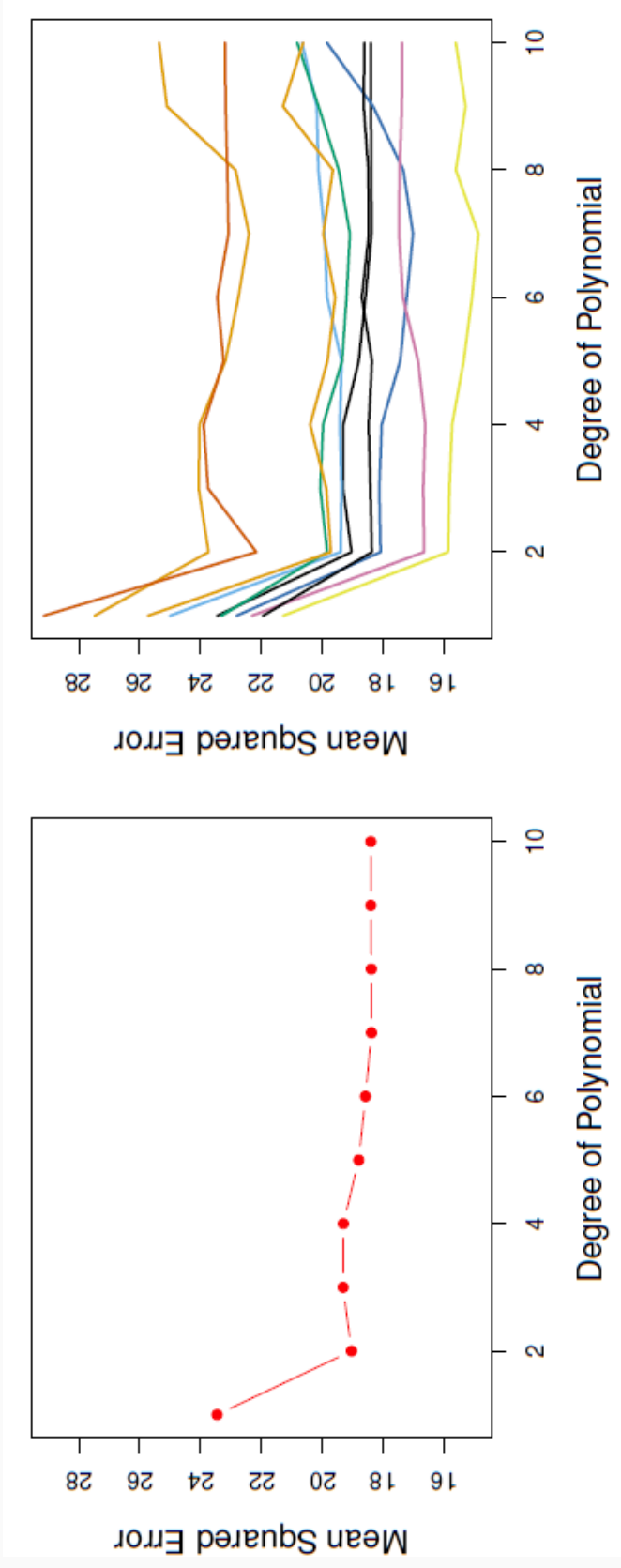
Geçerleme Yaklaşımı

- Pratikte genellikle elimizde sadece bir veri seti vardır. Modelin kestirim başarısını ölçebileceğimiz ayrı bir test veri seti genellikle yoktur.
- Bu durumda verileri rassal olarak iki gruba ayırabiliriz: eğitim verisi ve geçerleme (validation, hold-out) verisi



- Model sadece eğitim verileriyle tahmin edilir. Geçerleme verileri kullanılarak kestirimler oluşturulur ve test hatası hesaplanır.

Örnek: Polinom regresyonu



- Veri seti rassal olarak ikiye bölündü ve her seferinde geçерleme verilerinden hareketle her polinom derecesi için MSE hesaplandı. Solda: tek geçерleme seti
- Sağda: 10 kere tekrarlanmış geçерleme MSE değeri. Fazla değışkenlik olduğuna dikkat ediniz.

Geçerleme yaklaşımı

Zayıf tarafları

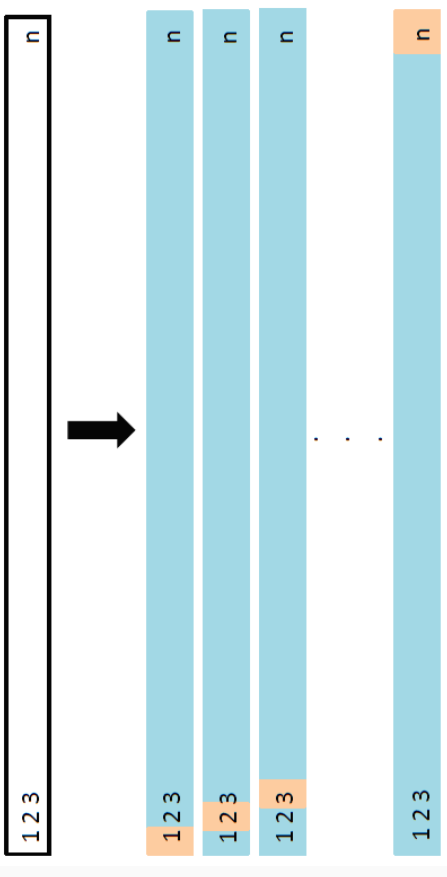
- Veriler rastgele ikiye ayrıldığı için buradan kaynaklı belirsizliği dikkate almamız gerekir. Bunun için süreci tekrar ederek çok sayıda rastgele geçerleme tahminleri yaptığımızda da, önceki grafikte görüldüğü gibi, yüksek değişkenlik gözlemlenmektedir.
- Geçerleme yaklaşımında sadece eğitim verilerinin model tahmininde (eğitiminde) kullanıldığı unutulmamalıdır. Geçerleme veri seti her bir model için (örneğimizde her bir p için) sadece kestirim hatalarının hesaplanmasında kullanılır. Eğitim setinde daha az veri kullanıldığı için modellerin performansı azalır. Sonuçta geçerleme hatası test hatasını olduğundan yüksek tahmin edebilir.
- Alternatifler
 - Biri-hariç Çapraz Geçerleme (Leave-one-out Cross Validation)
 - k -katlı Çapraz Geçerleme (k -fold Cross Validation)

Biri-hariç Çapraz Geçerleme

LOOCV (Leave-one-out Cross Validation)

- Gözlemlerden sadece biri geçerlemede kullanılır; geriye kalan $(n-1)$ gözlem modelin eğitiminde kullanılır.
- Bu süreç her seferinde bir gözlem eğitimden dışlanacak şekilde n kere tekrarlanır ve her biri için MSE_i elde edilir.
- Bu n MSE değerinin ortalaması test hata tahminidir:

$$CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n MSE_i$$

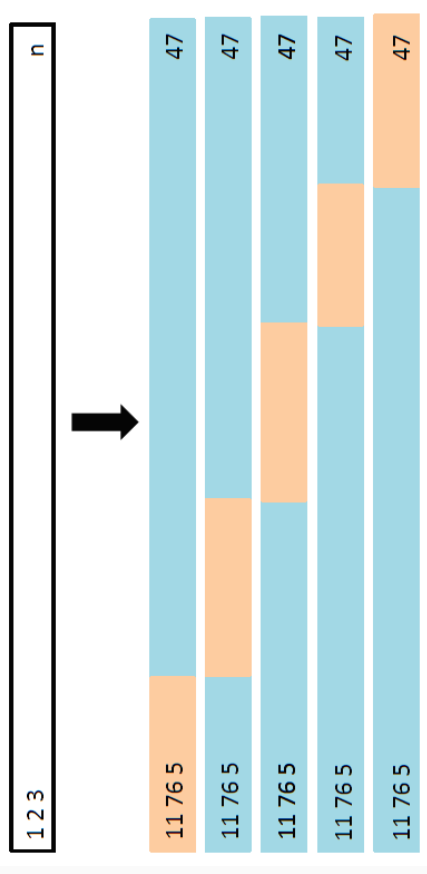


k -Katlı Çapraz Geçerleme

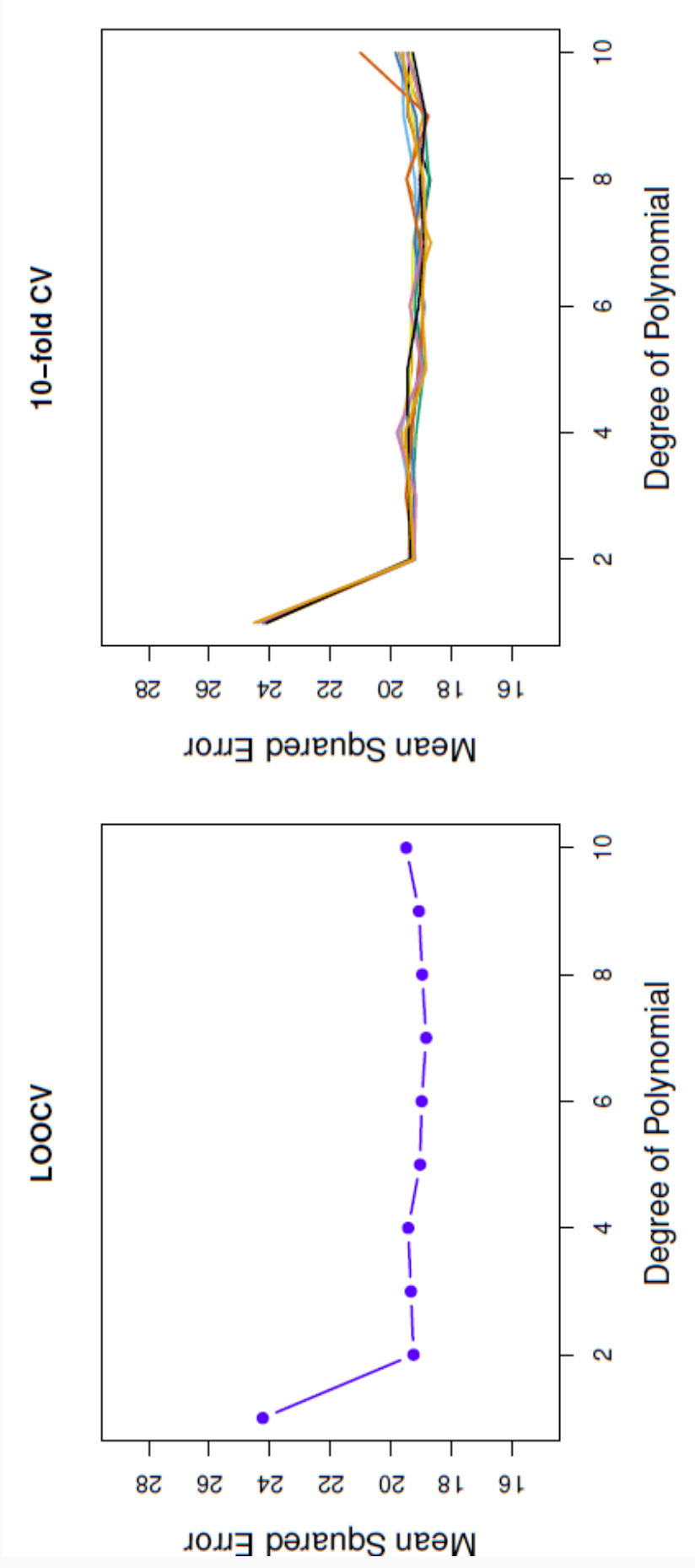
k -Fold Cross Validation

- Biri-hariç çapraz geçerleme n büyük olduğunda hesaplamada zorluk çıkarabilir.
- Alternatif olarak gözlemler rassal şekilde k gruba (kat) ayrılabilir.
- Sırasıyla her kat geçerleme seti olarak kullanılır; geriye kalan gözlemlerle model eğitilir.
- Sonuçta elimizde k tane MSE değeri vardır. Test hata tahmini bunların ortalamasıdır:

$$CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k MSE_i$$



Örnek



Solda: Auto veri seti için (bkz önceki örnek) Biri-hariç Çapraz Geçerleme MSE değerleri,
Sağda: $k = 10$ katlı Çapraz Geçerleme (Kaynak: James et al., ISLR Fig-5.4, p.180)

k -Katlı Çapraz Geçerlemede Sapma-Varyans

- k -Katlı çapraz geçерleme (ÇG) biri-hariç çapraz geçерlemeye göre hesaplama açısından avantaj sağlar.
- Ancak asıl önemli avantaj test hatasının biri-hariç çapraz geçерlemeye (LOOCV) göre daha doğru tahmin edilmesidir.
- Çapraz geçерleme test hatasını fazla tahmin etme eğilimlidir. LOOCV ise test hatasını sapmasız tahmin eder. k -katlı ÇG bu ikisinin arasında bir yerdedir.
- Bu açıdan bakıldığında her seferinde LOOCV'yi tercih etmemiz gerekir.
- Ancak k -katlı çapraz geçерlemenin varyansı biri-hariç ÇG'ye göre daha düşüktür.
- Bunun sebebi LOOCV'de test tahminlerinin birbiriyle çok yüksek ilişkili olmasıdır.

Sınıflandırma Problemlerinde Çapraz Geçerleme

- Çapraz Geçerleme yaklaşımı, çıktı değişkeni y 'nin nitel olduğu sınıflandırma problemlerinde de kullanılabilir.
- Bu durumda, daha önce gördüğümüz gibi, sınıflama hatasını

$$Err_i = I(y_i \neq \hat{y}_i)$$

olarak tanımlarsak Biri-Hariç Çapraz Geçerleme test hatası aşağıdaki gibi tanımlanabilir:

$$CV_{(n)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Err_i$$

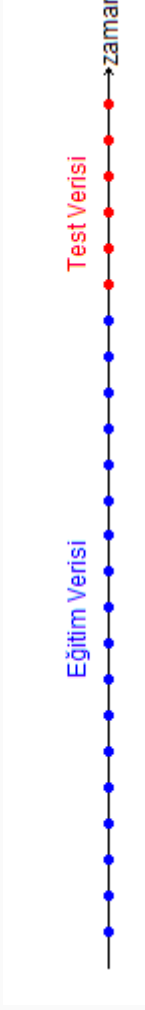
- Benzer şekilde k -Katlı ÇG:

$$CV_{(k)} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^n Err_i$$

Zaman Serisi Verileri

- Zaman serisi verileriyle öngörü modellerin örneklem-dışı (out-of-sample) öngörü başarısı değerlendirilirken iki yaklaşım benimsenebilir.
- Geleneksel Yaklaşım ve Çapraz Geçerleme Yaklaşımı
- Zaman serileri genellikle türdeş ve bağımsız (iid) olmaz. Ayrıca verilerdeki kronolojik yapının bozulmaması gerekir. Bu nedenle rassal örneklemeyle çapraz geçerleme yapamayız.

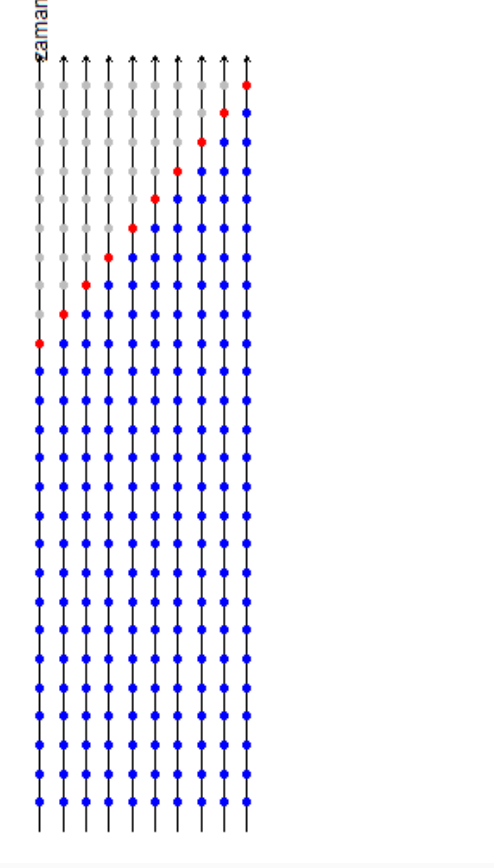
Geleneksel Yaklaşım



- Veriler eğitim ve test kısımlarına ayrılır. Test verileriyle öngörü hataları hesaplanır.

Çapraz Geçerleme

Zaman Serisi Çapraz Geçerleme



- Öngörüler Biri-Hariç çapraz geçerlemede olduğu gibi bir test gözleminden hareketle hesaplanır.
- İzleyen adımda bir önceki test gözlemi eğitim setine eklenir ve model tekrar tahmin edilir. Bu modelden hareketle yeni bir öngörü oluşturulur.
- Tüm test verileri için aynı işlem yapılır. En sonunda öngörü hatalarının ortalaması hesaplanır.

Detaylar için bkz. Hyndman, R.J., & Athanasopoulos, G. (2019) Forecasting: principles and practice, 3rd edition, OTexts: Melbourne, Australia. <https://otexts.com/fpp3/>