

Sınıflandırma Problemleri

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

Hüseyin Taştan
Yıldız Teknik Üniversitesi

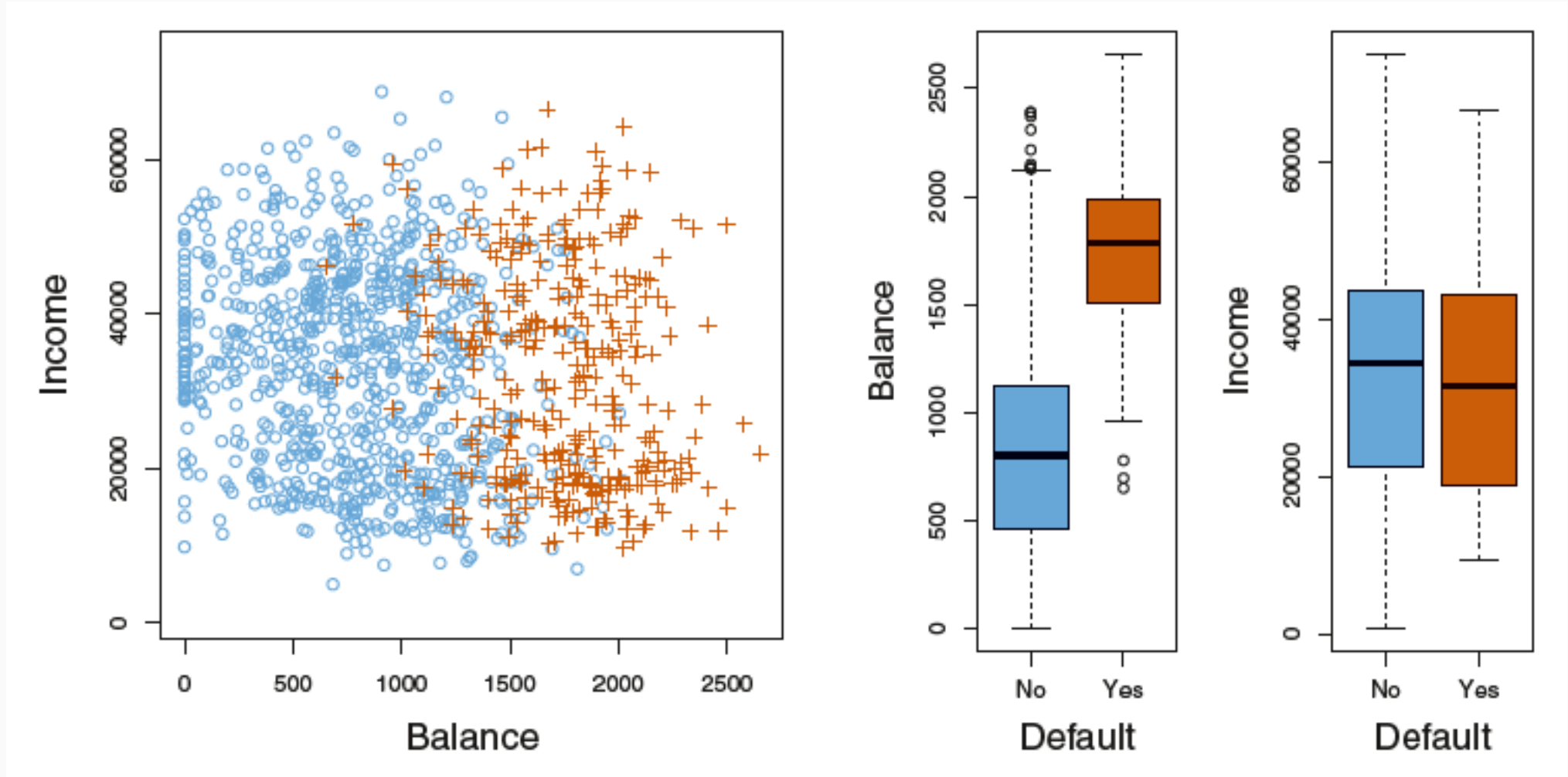
Plan

- Sınıflandırma problemleri
- Lojistik regresyon
- Doğrusal Diskriminant Analizi (LDA)
- Karesel Diskriminant Analizi (QDA)
- Sınıflandırma performansının ölçümü
- ROC eğrisi ve AUC

Sınıflandırma Problemi

- Regresyon analizinde Y tepki değişkeni niceldir.
- Y kategorik bir değişken = sınıflandırma problemi
- Sınıflandırıcı: verilmiş bir X değişken seti için Y 'nin kategorisini kestiren yöntem.
- İkili ya da çoklu olabilir.
- Örnek: bir banka kredi başvuru sahibinin özelliklerinden hareketle kişinin geri ödeyememe olasılığını hesaplamak isteyebilir. Kişinin sınıflandırıldığı gruba göre başvurusu red ya da kabul edilir.
- Veri seti: default (Yes/No), X değişkenleri: kredi kartı bakiyesi (balance), gelir (income), öğrenci kuklası (student)

Sınıflandırma: Örnek



Mavi: Default=NO, Kavuniçi: Default=YES (ISLR Fig-4.1, p.129)

Regresyon kullanabilir miyiz?

- Standart regresyon analizi ile gözlemleri sınıflandırabilir miyiz? Burada iki sınıf olduğunu varsayıyoruz. Örneğin

$$default = \beta_0 + \beta_1 income + \beta_2 balance + \epsilon$$

Burada default ikili (0/1) değerler almaktadır.

- Sınıflandırma kuralı: OLS tahmin değeri 0.5'den büyükse default=YES (1) grubuna değilse default=NO (0) grubuna sınıflandırma yapabiliriz.
- Ancak kestirim değerlerinin 0 ile 1 arasında olmasının garantisi yoktur. Herhangi bir değeri alabilirler hatta negatif olabilirler.
- Ayrıca doğrusal olasılık modelinde hata terimi sabit varyanslı değildir.
- Tepki değişkeni ikiden fazla gruba sahipse uygulanamaz.

Lojistik Regresyon

- Doğrudan tepki değişkenini modellemek yerine sınıflandırma olasılığını modelleyebiliriz.

$$p(X) = \beta_0 + \beta_1 X$$

Burada $p(X) = Pr(Y = 1|X)$ tepki değişkeninin grup=1 olarak sınıflandırılma (koşullu) olasılığıdır.

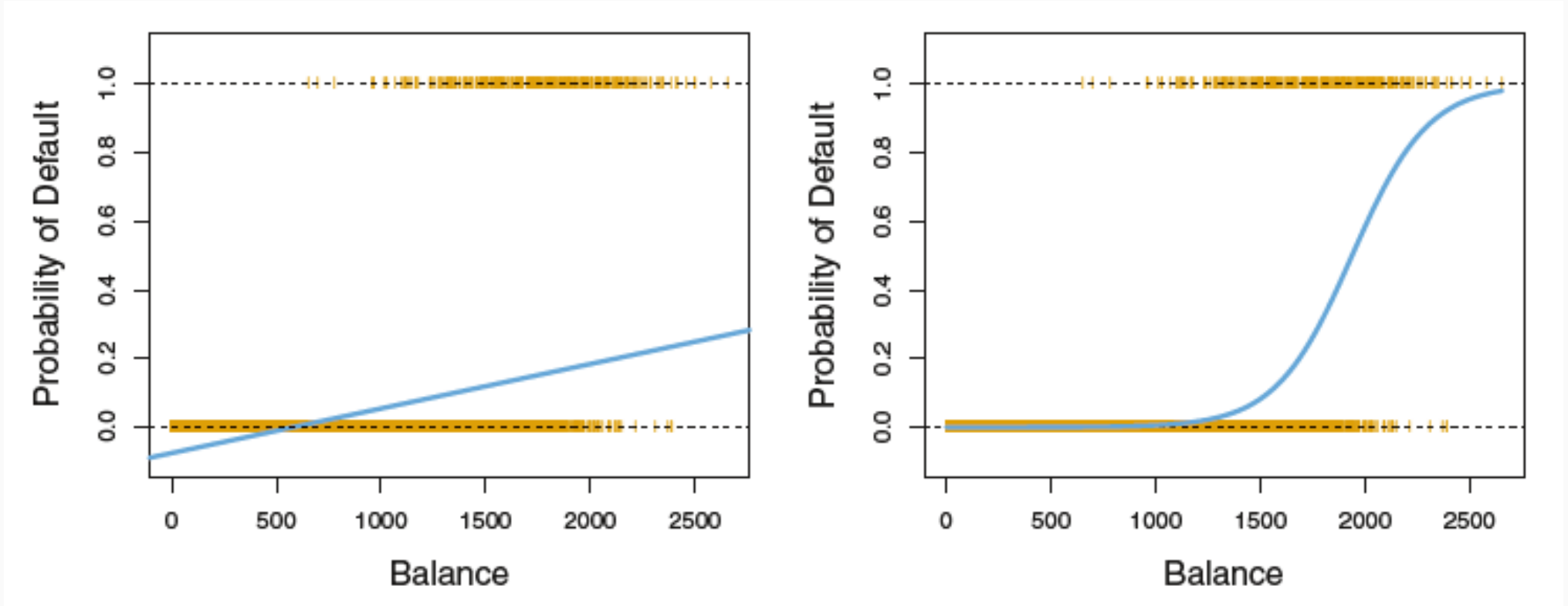
- Tanım gereği $0 \leq p(X) \leq 1$. Örneğin, lojistik fonksiyon

$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X}}$$

- Logit modeli

$$\log\left(\frac{p(X)}{1 - p(X)}\right) = \beta_0 + \beta_1 X$$

Lojistik vs. Doğrusal Olasılık Modeli



Sol: doğrusal regresyon ile tahmin edilen koşullu olasılıklar, **Sağ:** Lojistik regresyon ile tahmin edilen koşullu olasılıklar (ISLR Fig-4.2, p.131)

Lojistik Regresyonun Tahmini

- Modelin tahmininde OLS kullanılamaz.
- En Yüksek Olabilirlik (Maximum Likelihood) yöntemi tutarlı ve etkin tahminler verir.
- Katsayılar hesaplandıktan sonra koşullu olasılıklar hesaplanabilir.
- Sınıflandırma işlemi koşullu olasılık tahminlerine göre yapılabilir.

Çoklu Lojistik Regresyon

- Çok sayıda nicel ya da nitel kestirim değişkeni için model kolayca genelleştirilebilir:

$$p(X) = \frac{e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p}}{1 + e^{\beta_0 + \beta_1 X_1 + \dots + \beta_p X_p}}$$

- Modelin doğrusal olmayan yapısından dolayı katsayılar koşullu olasılıklardaki değişim olarak yorumlanamaz. Ancak işaretleri yorumlanabilir.
- $\hat{\beta}_j$ 'lar bulunduktan sonra X_j değerleri birlikte yukarıdaki denklemde yerlerine yazılarak koşullu olasılıklar tahmin edilir.

Doğrusal Diskriminant Analizi

- Doğrusal diskriminant analizinde (LDA - Linear Discriminant Analysis) her grup için ayrı ayrı olmak üzere X değişkenlerinin dağılımı modellenir.
- Daha sonra Bayes Teoremi'nden hareketle asıl ilgilendiğimiz $Pr(Y = k|X = x)$ olasılıkları tahmin edilir.
- Sınıfların birbirinden çok ayırık olduğu durumlarda lojistik regresyon istikrarsız olabilir. LDA'nde böyle bir problem yoktur.
- n küçük olsa da değişkenler yaklaşık olarak normal dağılıyorsa LDA daha istikrarlı.
- LDA ikiden daha fazla grup olduğunda da uygulanabilir.

Sınıflandırmada Bayes Teoreminin Kullanımı

- Gözlemleri $K \geq 2$ sınıfa ayırmak istediğimizi düşünelim. Çıktı değişkeni $Y_i = k$, $k = 1, 2, \dots, K$ değerlerini almaktadır (sıralama önemsiz)
- Önsel olasılık (prior): π_k , rassal çekilmiş bir gözlemin k sınıfına ait olma olasılığı
- k sınıfı için X değişkeninin yoğunluk fonksiyonu: $f_k(x) \equiv \Pr(X = x | Y = k)$ (basitlik için X 'in kesikli bir değişken olduğunu varsaydık)
- $f_k(x)$ 'in yorumu: X 'in k sınıfından çekilme olasılığı yükseldikçe daha büyük değerler alır.
- Şimdi Bayes teoremini uygulayabiliriz:

$$p_k(X) \equiv \Pr(Y = k | X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{l=1}^K \pi_l f_l(x)}$$

- $p_k(X)$ 'i doğrudan tahmin etmek yerine bileşenleri tahmin edebiliriz.

Sınıflandırmada Bayes Teoreminin Kullanımı

Ardıl (posterior) olasılık dağılımı:

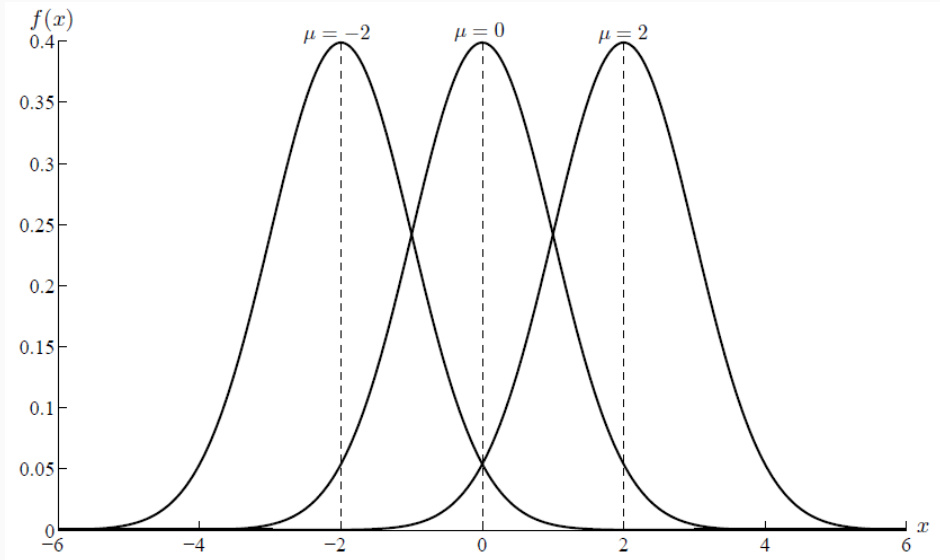
$$p_k(X) \equiv \Pr(Y = k \mid X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{l=1}^K \pi_l f_l(x)}$$

- π_k verilerden kolayca tahmin edilebilir. k grubunun örneklemdaki oranını hesaplamak yeterli.
- Ancak $f_k(x)$ 'in tahmini daha zor. Dağılımsal varsayımlar yapmamız gerekir.
- LDA: normal dağılım. Örneğin, $p = 1$ için

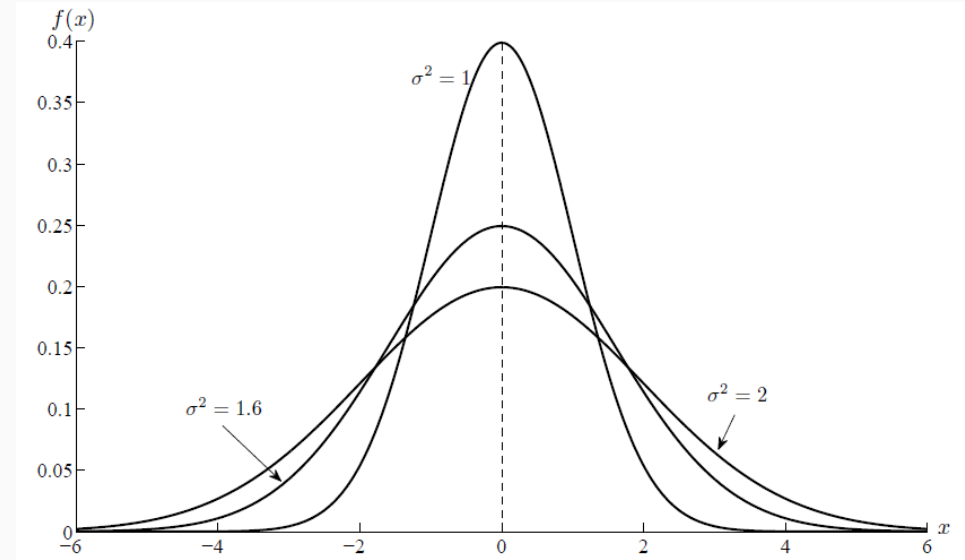
$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_k^2}(x - \mu_k)^2\right)$$

Normal Dağılım

Farklı ortalamalar, varyans aynı



Farklı varyanslar, ortalama aynı



LDA, $p=1$ için koşullu olasılıklar

- Tek kestirim değişkeni $p = 1$ için normal dağılım ve her grup için aynı varyans (σ^2) varsayımları altında koşullu olasılıklar

$$p_k(x) = \frac{\pi_k \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x - \mu_k)^2\right)}{\sum_{l=1}^K \pi_l \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x - \mu_l)^2\right)}$$

- Bayes sınıflandırıcısı verilmiş bir $X = x$ gözlemini $p_k(x)$ 'in en yüksek olduğu gruba atar.
- $p_k(x)$ 'in doğal logaritmasını alırsak **diskriminant** fonksiyonunu elde ederiz:

$$\delta_k(x) = x \cdot \frac{\mu_k}{\sigma^2} - \frac{\mu_k^2}{2\sigma^2} + \log(\pi_k)$$

kategori kestirimlerini en yüksek $\delta_k(x)$ değerine göre yapabiliriz.

LDA katsayılarının tahmini

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_k} \sum_{i:y_i=k} x_i$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n - K} \sum_{k=1}^K \sum_{i:y_i=k} (x_i - \hat{\mu}_k)^2$$

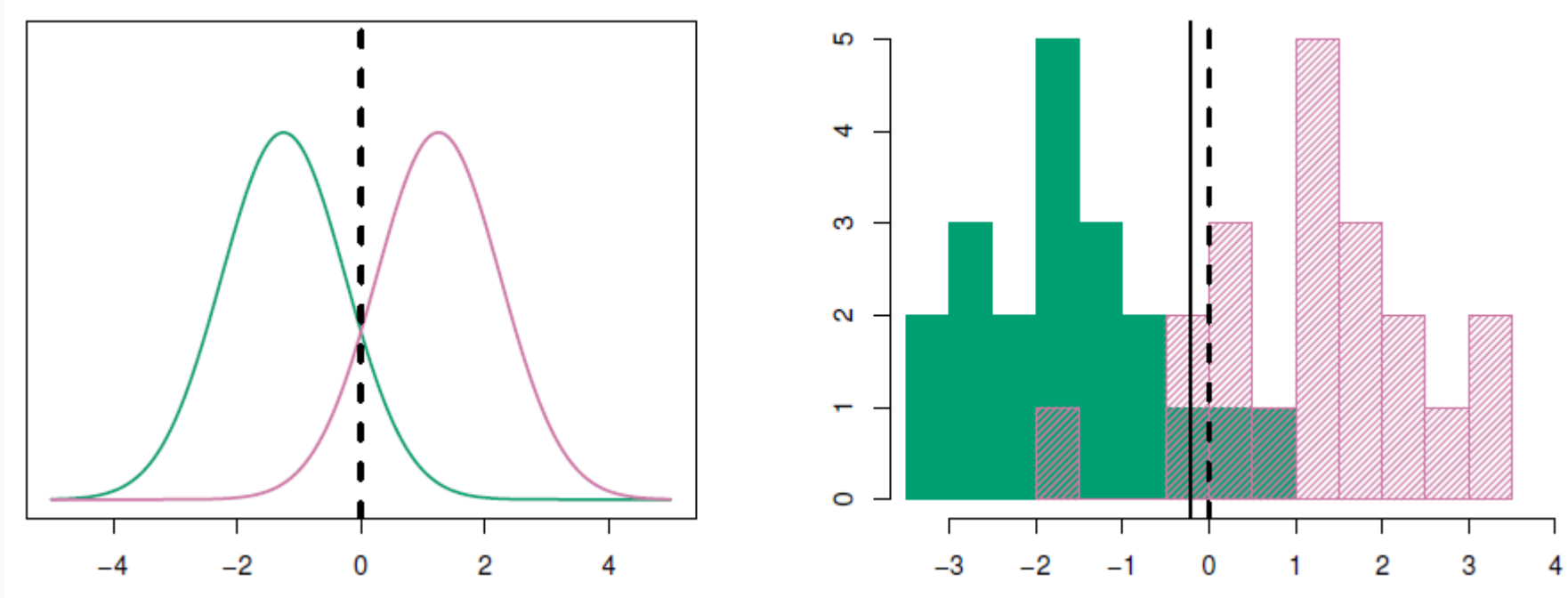
$$\hat{\pi}_k = n_k/n$$

Bu tahminleri diskriminant fonksiyonu içine yazarsak:

$$\hat{\delta}_k(x) = x \cdot \frac{\hat{\mu}_k}{\hat{\sigma}^2} - \frac{\hat{\mu}_k^2}{2\hat{\sigma}^2} + \log(\hat{\pi}_k)$$

LDA: Örnek

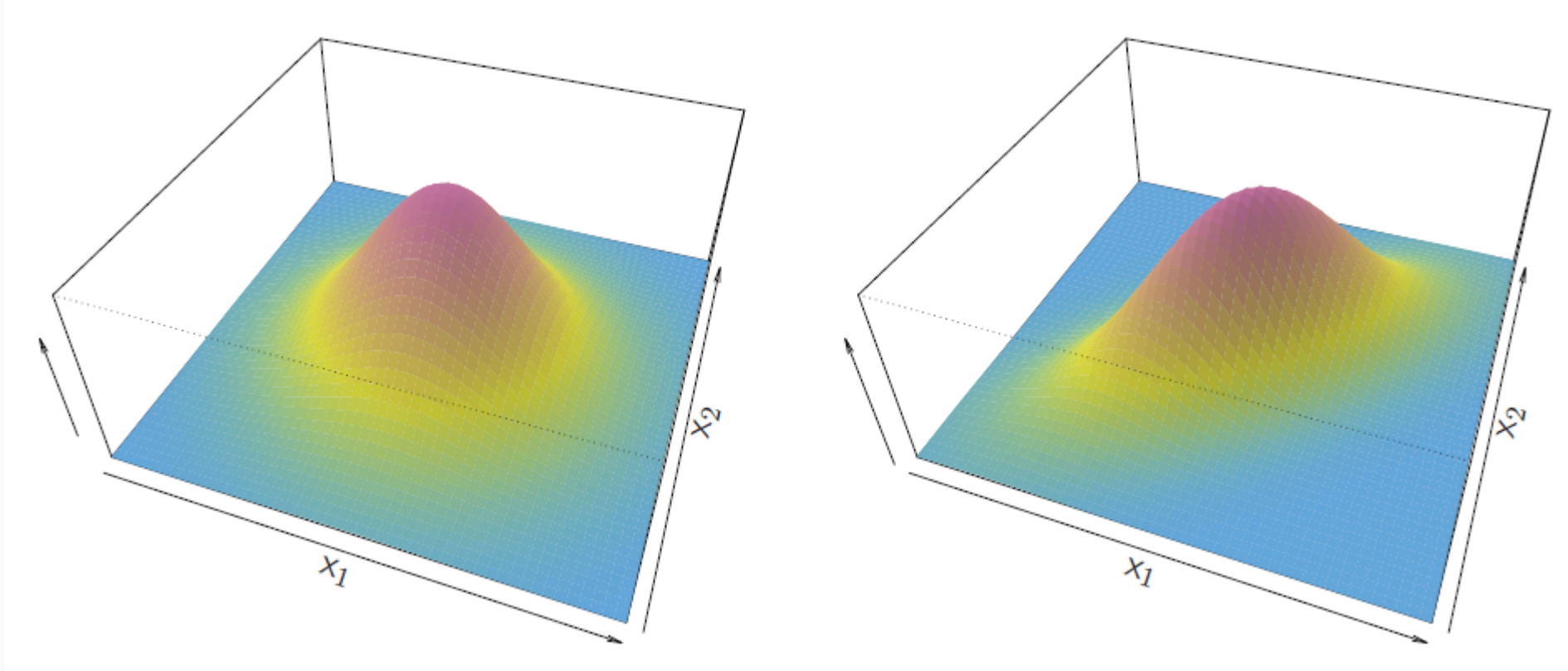
İki grup için farklı normal dağılım yoğunluk fonksiyonları (sol) ve verilerden hareketle oluşturulan histogramlar:



Not: (Sol) dikey kesikli çizgi Bayes karar sınırır (simülasyonla oluşturulduğu için biliniyor), (sağ) Dikey çizgi eğitim verisiyle tahmin edilen LDA karar sınırır. (ISLR, Fig. 4.4, p.140)

Çok değişkenli LDA

- Kestirim değişkenleri: $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_p)$
- Dağılımsal varsayım (Çok değişkenli Normal - Gaussian - dağılım): $\mathbf{X} \sim N(\mu, \Sigma)$



Sol: X_1 ve X_2 ilişkisiz, Sağ: ilişkili, kovaryans = 0.7

Çok değişkenli LDA

Çoklu Gaussian yoğunluk fonksiyonu.

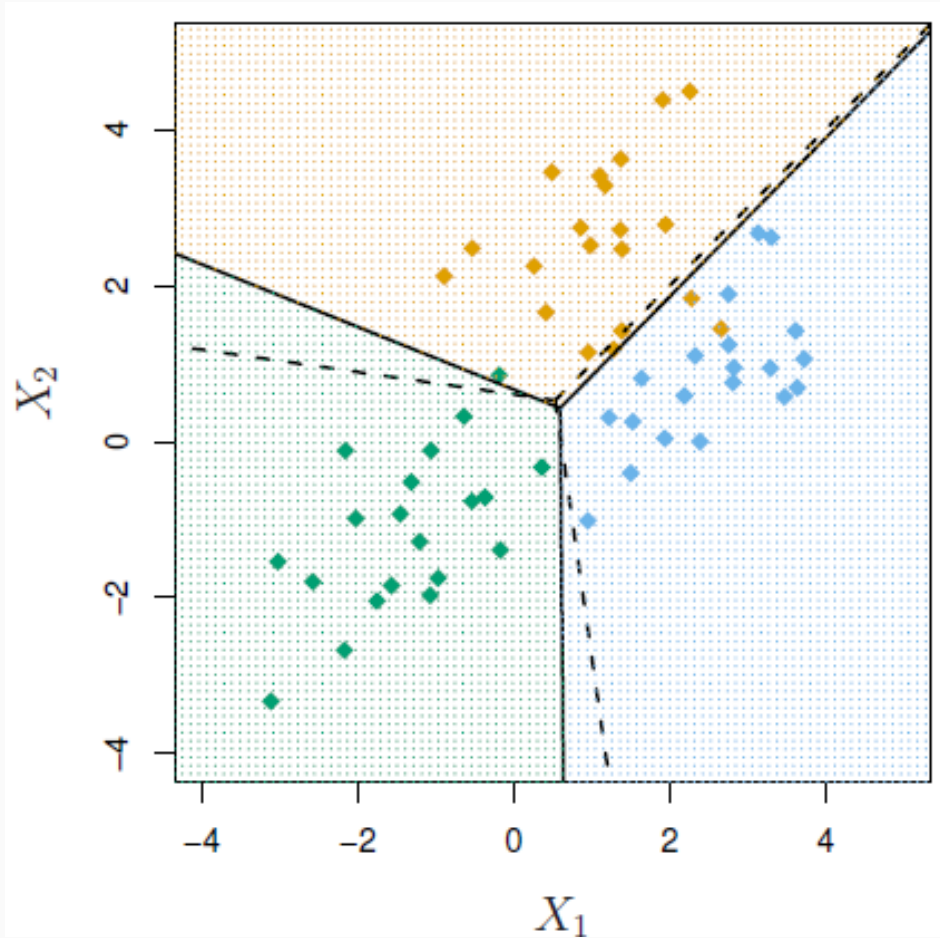
$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2} |\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} \exp \left(-\frac{1}{2} (x - \mu)^T \mathbf{\Sigma}^{-1} (x - \mu) \right)$$

$p = 1$ durumundakine benzer adımları takip ederek sınıflandırmada kullanacağımız diskriminant fonksiyonunu elde ederiz:

$$\delta_k(x) = x^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_k - \frac{1}{2} \mu_k^T \mathbf{\Sigma}^{-1} \mu_k + \log \pi_k$$

Verilmiş bir x gözlemi $\delta_k(x)$ 'in en büyük olduğu gruba atanır.

Örnek



- 2 kestirim değişkeni X_1, X_2
- Grup sayısı $K = 3$
- Her gruptaki gözlem sayısı 20
- Kesikli çizgiler LDA sınıflandırma sınırları
- Düz çizgiler Bayes sınırları
- LDA hata oranı = 0.0770
- Bayes hata oranı = 0.0746

Örnek: Borç ödememe (default) verileri

	default	student	balance	income
1	No	No	729.52650	44361.625
2	No	Yes	817.18041	12106.135
3	No	No	1073.54916	31767.139
4	No	No	529.25060	35704.494
5	No	No	785.65588	38463.496
6	No	Yes	919.58853	7491.559
7	No	No	825.51333	24905.227
8	No	Yes	808.66750	17600.451
9	No	No	1161.05785	37468.529
10	No	No	0.00000	29275.268
11	No	Yes	0.00000	21871.073

- n=10000
- Balance = kredi kartı bakiyesi
- income = gelir düzeyi
- Student = öğrenci kuklası
- default = borç ödeyememe ikili değişken (Yes=borçlu, No= borçlu değil)

Örnek

- Kredi kartı bakiyesi ve öğrenci kuklası değişkenleri ile LDA tahmin ettiğimizde eğitim seti hata oranı %2.75. Bu oldukça düşük bir hata oranı gibi görünüyor.
- Verilerde borcunu ödeyemeyenlerin oranı (default=YES) %3.33. Bir gözlemi kredi kartı bakiyesinden ve öğrenci olup olmadığından bağımsız olarak "borçlu değil" (default=NO) diye sınıflandırsak (null classifier) yapacağımız hata oranı %3.33 olur.
- Bu açıdan baktığımızda LDA hata oranı aslında çok da başarılı değil.

Sınıflandırma Performansının Ölçümü

Hata Matrisi (Confusion Matrix)

		GERÇEK -	GERÇEK +	
TAHMİN -	-	A	B	A + B
TAHMİN +	+	C	D	C + D
	Toplam	A + C	B + D	A + B + C + D

- Tablo hücreleri gözlem sayılarıdır
- A = Doğru tahmin edilen gerçek negatif sayısı
- D = Doğru tahmin edilen gerçek pozitif sayısı
- C = Yanlış pozitif sayısı
- B = Yanlış negatif sayısı

- Yanlış pozitif oranı (false positive rate): $FP = C / (A + C)$
- Doğru pozitif oranı. $TP = D / (B + D)$ (duyarlılık - sensitivity)
- Doğru negatif oranı. $A / (A + C)$ (özgüllük - specificity)
- Pozitif kestirimsel değer: $PP = D / (C + D)$, Negatif kestirimsel değer: $NP = A / (A + B)$

Sınıflandırma Performansının Ölçümü

Hata Matrisi (Confusion Matrix)

		<i>True default status</i>		
		No	Yes	Total
<i>Predicted default status</i>	No	9,644	252	9,896
	Yes	23	81	104
	Total	9,667	333	10,000

- Default = YES (Pozitif grup - borcunu ödemeyenler)
- Default = NO (Negatif grup - borcunu zamanında ödeyenler)

- Bu örnekte Doğru tahmin edilen gözlem sayısı $9644+81=9725$ 'dir. Toplamdaki payı ise %97.25'dir.
- Yanlış sınıflanan gözlem sayısı ise $252+23=275$. Yanlış sınıflama oranı ya da hata oranı % 2.75'dir.
- Gerçekte borçlu olmadığı halde yanlışlıkla borçlu olarak sınıflandırılanların oranı $23/9667 = 0.00238$, yani %0.238 gibi çok küçük bir orandır.
- Ancak Gerçekte borçlu olanlar içinde %75.7'si yanlışlıkla borçlu değil grubundadır ($252/333$)

Sınıflandırma Performansının Ölçümü

Hata Matrisi (Confusion Matrix)

		<i>True default status</i>		
		No	Yes	Total
<i>Predicted default status</i>	No	9,644	252	9,896
	Yes	23	81	104
	Total	9,667	333	10,000

- Default = YES (Pozitif grup - borcunu ödemeyenler)
- Default = NO (Negatif grup - borcunu zamanında ödeyenler)

- Özgüllük (specificity): $(1 - 23/9667) \times 100 = \% 99.8$
- Genel hata oranı düşük olsa da Default (YES) grubu içindeki hata oranı çok yüksek.
- Doğru pozitif oranı ya da duyarlılık (sensitivity) $\% 24.3 (= 100 \times 81/333)$
- Yanlış negatif oranı $= \%75.7 = 100 \times 252/333 = 1 - \text{duyarlılık}$. Yüksek risk grubundaki bireyleri tahmin etmek isteyen bir banka için bu oldukça yüksek.
- Yukarıdaki sınıflamada 0.5 eşik değerini kullandık. Yani koşullu olasılık 0.5'den büyükse default = YES grubuna atandı.

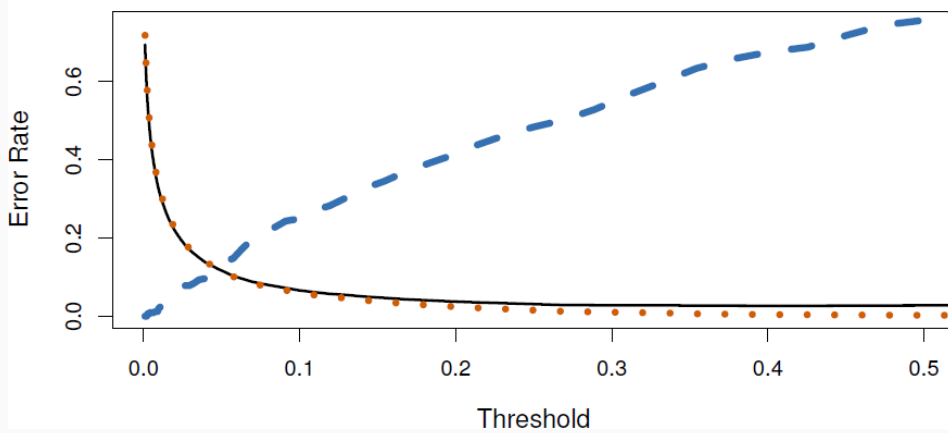
Farklı Eşik Değeri

$$Pr(default = YES|X) > 0.2$$

		<i>True default status</i>		
		No	Yes	Total
<i>Predicted default status</i>	No	9,432	138	9,570
	Yes	235	195	430
	Total	9,667	333	10,000

- Duyarlılık = $100 \times 195/333 = \%58.6$
 - Yanlış pozitif oranı ise $\%41.44 = 100 \times 138/333 (=1\text{-duyarlılık})$
 - Duyarlılık beklendiği gibi yükseldi ancak Borçlu olmadıkları halde yanlışlıkla borçlu olarak sınıflandırılanların oranı da yükseldi, $\%2.43 = 100 \times 235/9667$.
 - Genel hata oranı: $\%3.73$
-
- Borcunu ödemeyecek müşterileri öngörmek isteyen bir banka 0.5 yerine yukarıdaki gibi daha düşük bir eşik değeri kullanabilir.
 - Eşik değerini artırınca duyarlılık yükseldi (yanlış negatif oranı düştü) ancak genel hata oranı arttı. Bu ikisi arasındaki ödünüm izleyen grafikte verilmiştir.

Eşik değeri ve hata oranı

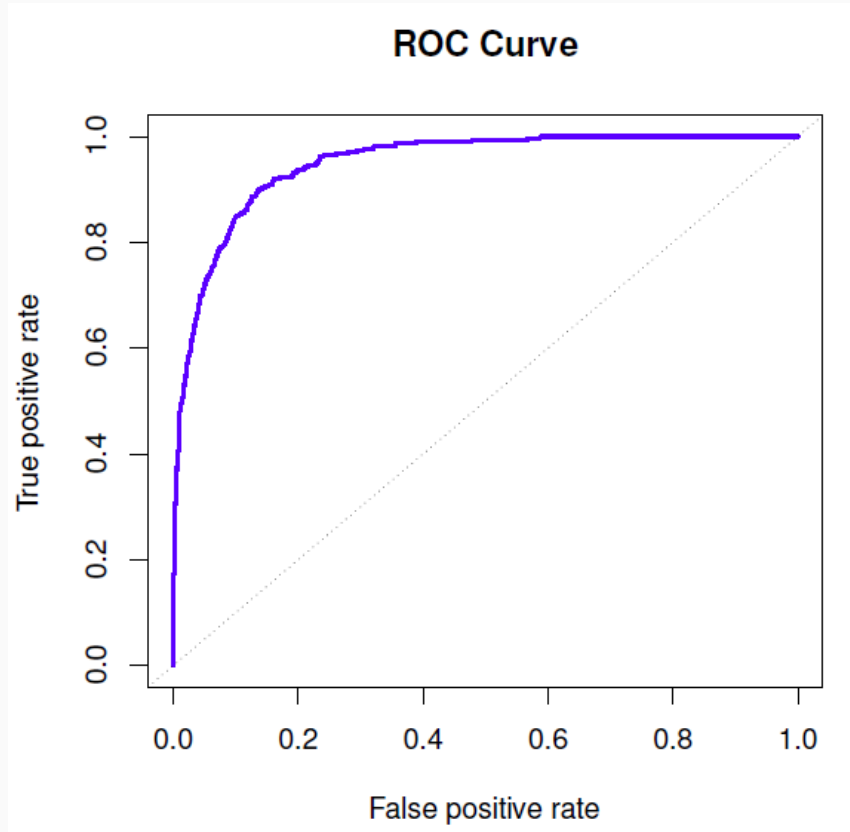


- Yandaki grafikte yatay ekseninde sınıflamada kullanılan eşik değeri
- Dikey eksen, siyah: genel hata oranı, kavuniçi nokta: yanlış pozitif oranı
- Mavi kesikli çizgi: Yanlış negatif oranı (bocunu ödemedikleri halde yanlışlıkla "borçlu değil" olarak sınıflandırma oranı)

- Eşik değeri 0.5 alındığında genel hata oranı en düşüktür. Ancak yanlış negatif oranı da en yüksektir.
- Eşik değeri azaldıkça, borcunu ödemeyenler içinde yanlış sınıflananların oranı (yanlış negatif oranı) azalmaktadır.
- Diğer taraftan, borcunu ödeyenler içinde yanlış sınıflananların oranı da artmaktadır.
- Uygun eşik değerinin seçiminde alan bilgisi kullanılabilir. Diğer taraftan olanaklı tüm eşik değerleri için ROC eğrisi de çizilebilir.

ROC Eğrisi

ROC (Receiver Operating Characteristics) ya da "Karar Değerlendirme Eğrisi" olanaklı tüm eşik değerleri için yanlış ve doğru pozitif oranlarını gösterir:



- Yatay eksen: yanlış pozitif oranı
- Dikey eksen: doğru pozitif oranı
- Tüm eşik değerleri için bu oranlar hesaplanıp grafik çizilir.
- Genel performans ölçütü = AUC
- AUC = Area Under the Curve (Eğrinin altındaki alan)
- Maks. AUC = 1, yüksek AUC tercih edilir.
- Rassal sınıflandırma: AUC = 0.5
- Default verileri için LDA modeli AUC = 0.95. Lojistik regresyon ile aynı.

Hata Matrisi: Özet

		TAHMİN EDİLEN		Toplam
		–	+	
GERÇEK DURUM	–	Doğru Negatif (DN)	Yanlış Pozitif (YP) Tip I Hata	N
	+	Yanlış Negatif (YN) Tip II Hata	Doğru Pozitif (DP)	P
Toplam		N*	P*	N+P=N*+P*

H_0 : – (hastalık yok)

H_a : + (hastalık var)

Yanlış Pozitif Oranı = YP/N = Tip I hata Oranı = $1 - \text{Özgüllük (specificity)}$

Doğru Pozitif Oranı = DP/P = Duyarlılık (sensitivity) = $1 - \text{Tip II Hata Oranı}$

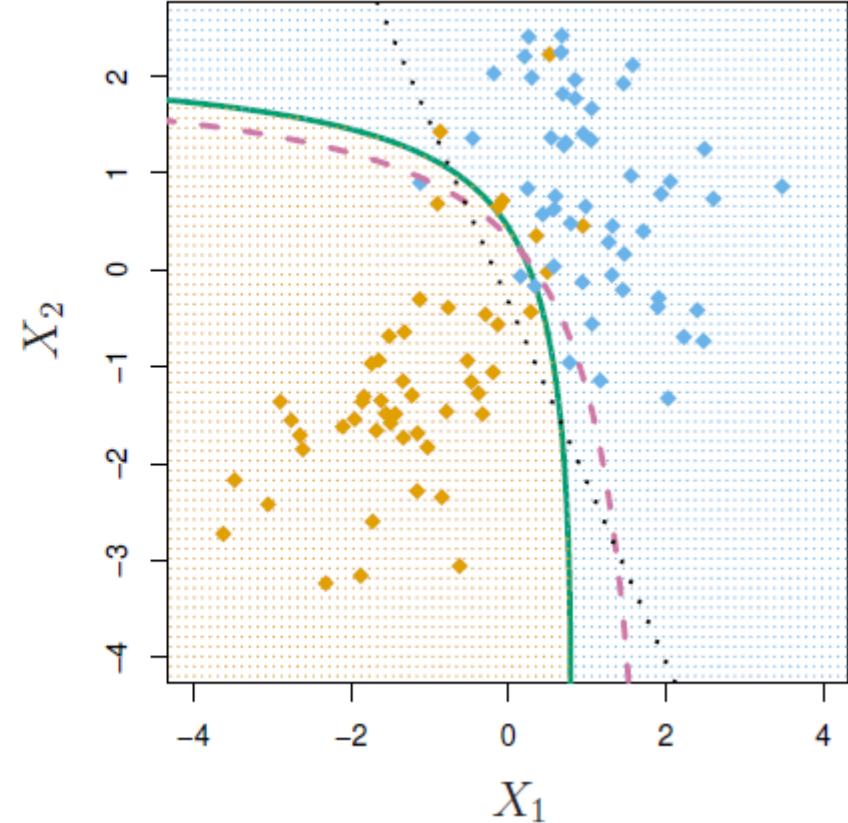
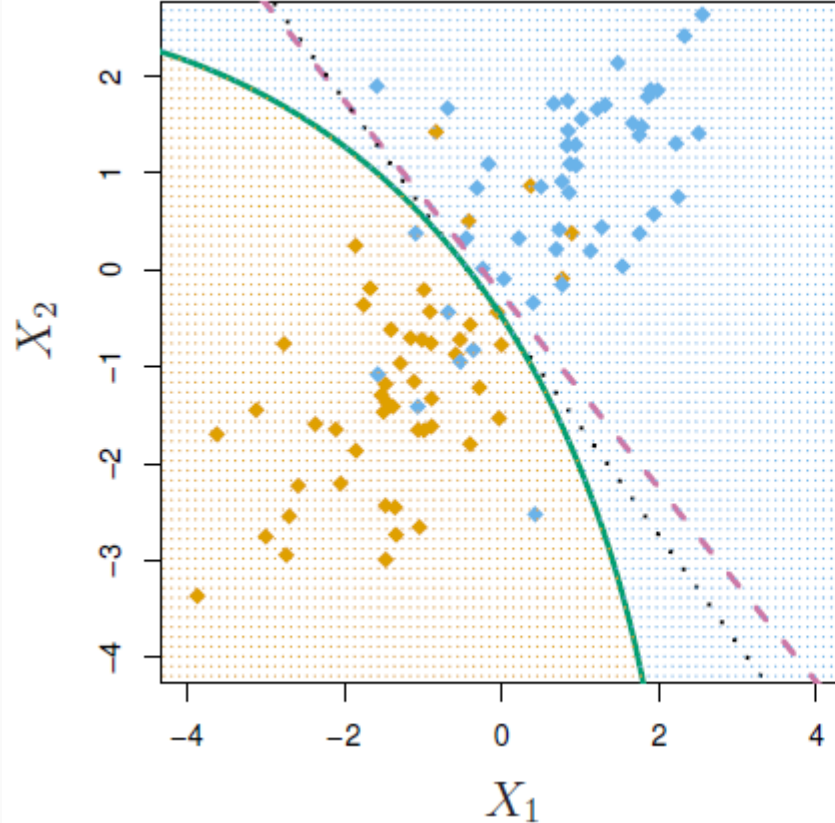
Tip I Hata: H_0 Doğru iken RED (gerçekte hasta olmadıkları halde hasta olarak sınıflandırma)

Tip II Hata: H_0 Yanlış iken KABUL (gerçekte hasta oldukları halde “hasta değil” diye sınıflandırma)

Karesel Diskriminant Analizi (QDA)

- LDA her grupta varyansın aynı olduğu varsayımını yapıyordu.
- Ancak bu varsayım sağlanmıyorsa LDA performansı kötüleşebilir.
- QDA (quadratic discriminant analysis) yöntemi LDA yöntemine benzer. Ortak varyans varsayımı yerine grup varyanslarının farklı olduğu varsayımını yapar.
- Farklı varyans varsayımı altında ortaya çıkan diskriminant fonksiyonu doğrusal değil kareseldir.
- Varyansların çok farklı olduğu verilerde QDA daha iyi bir başarıma sahip olabilir. Ancak her grupta yeterli gözlemlerin olması gerekir.
- Grup varyansları aynı ise LDA tercih edilebilir.

LDA vs. QDA



Sol: gerçek modelde varyans-kovaryans matrisi her iki grup için aynı. LDA (siyah kesikli) QDA (yeşil) yöntemine göre daha başarılı (mor kesikli: Bayes sınırı); **Sağ:** Grup varyansları farklı, QDA daha başarılı (kaynak: James et al., ISLR, Fig-4.9, p.150)