Sınıflandırma Problemleri

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

Hüseyin Taştan
Yıldız Teknik Üniversitesi

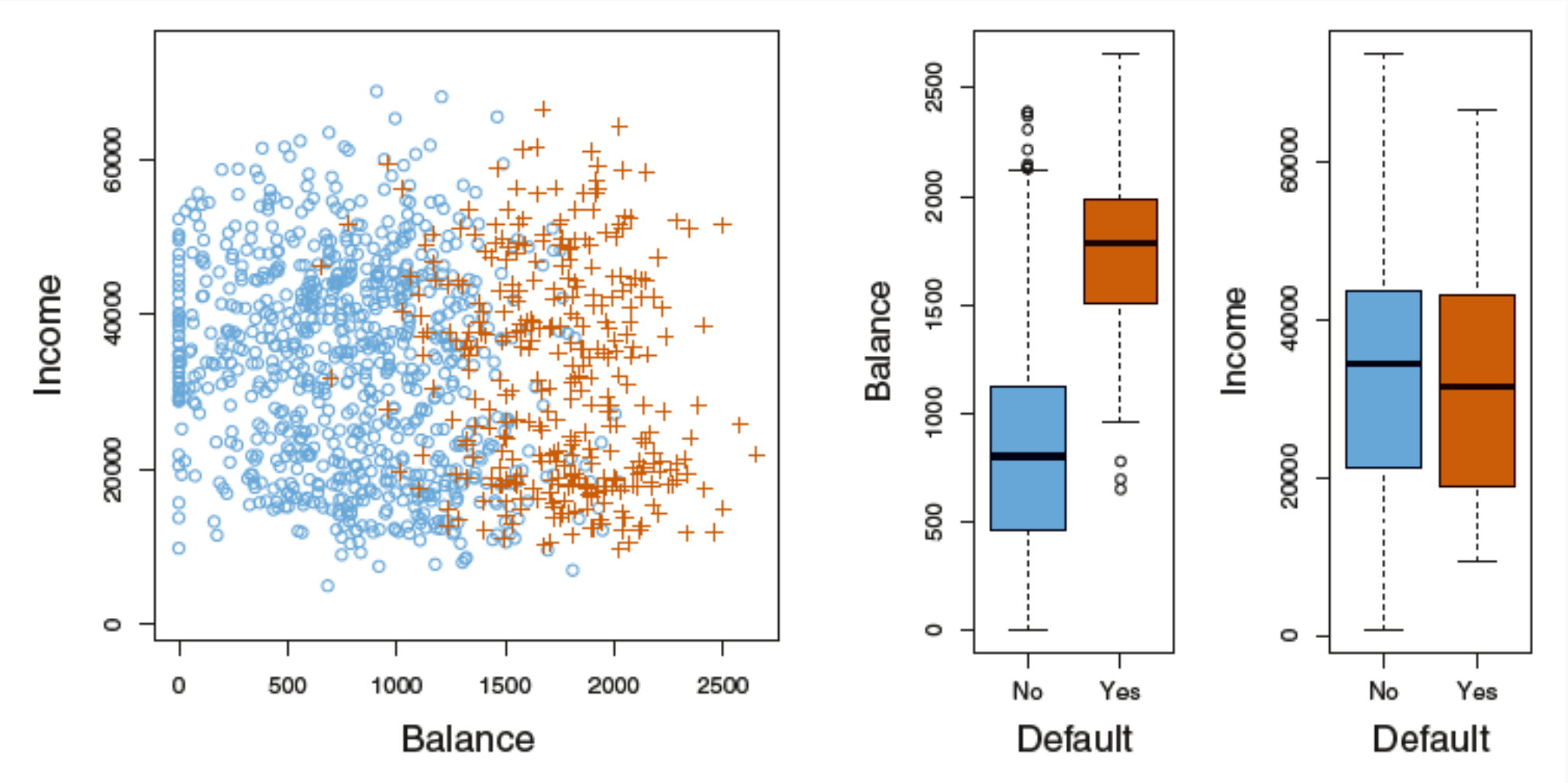
Plan

- 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.

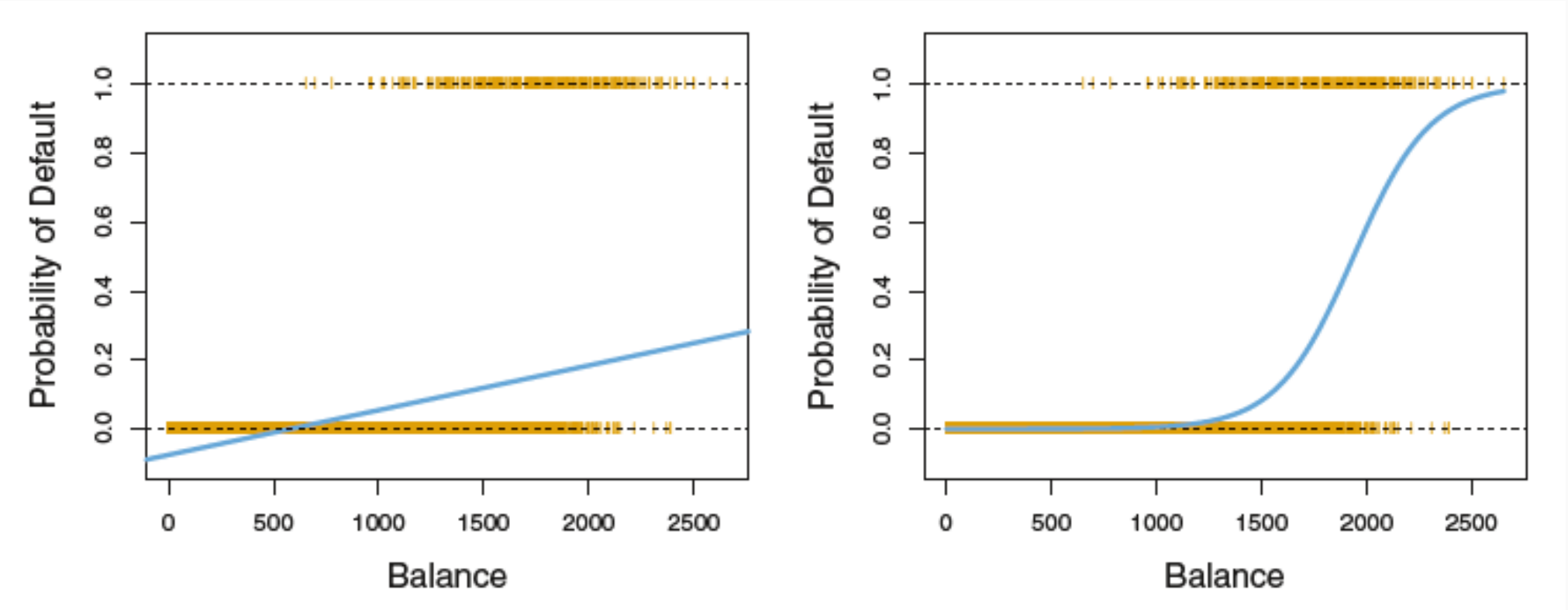
- Tanım gereği $0 \leq p(X) \leq 1$. Örneğin, lojistik fonksiyon

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

- 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 tahminciler 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:

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

- 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 ayrık 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 $Y_i = k,\ k = 1, 2, \ldots, K$ 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:

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

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

Sınıflandırmada Bayes Teoreminin Kullanımı

Ardıl (posterior) olasılık dağılımı:

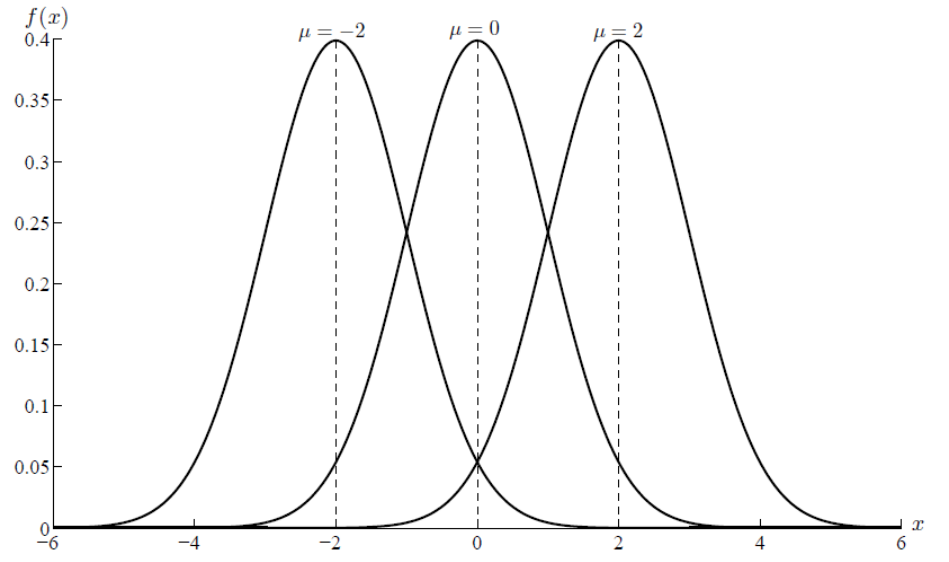
$$p_k(X) \equiv \Pr(Y = k \mid X = x) = \frac{\pi_k f_k(x)}{\sum_{l=1}^{K} \pi_l f_l(x)}$$

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

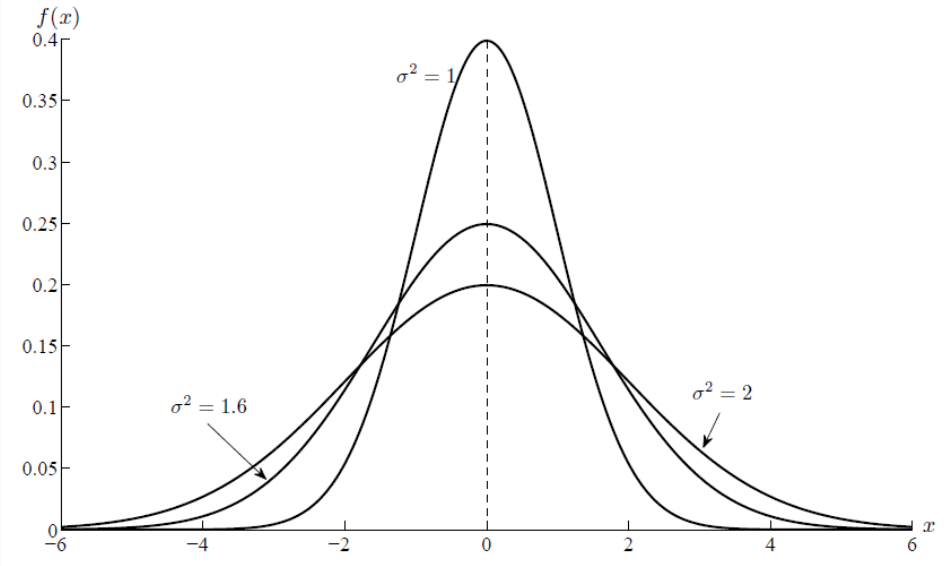
$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_k^2} (x - \mu_k)^2 \right)$$

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

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

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

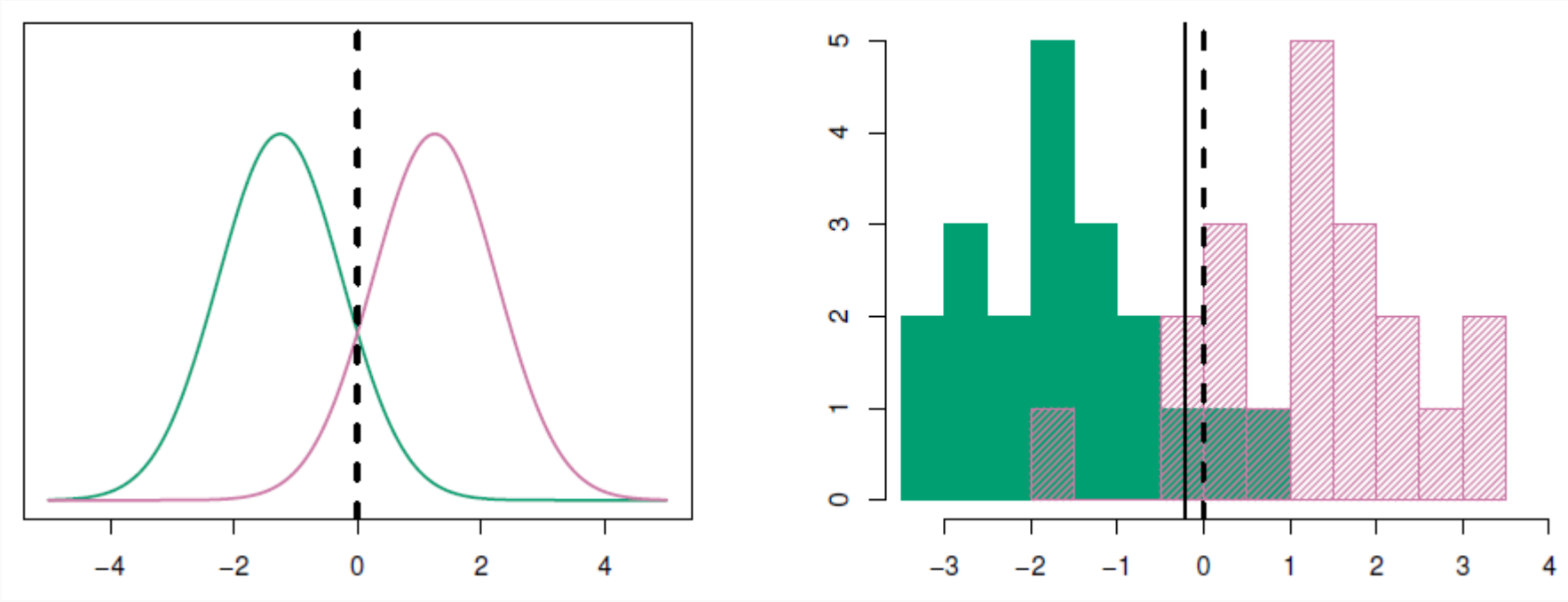
$$\hat{\pi}_k = n_k/n$$

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

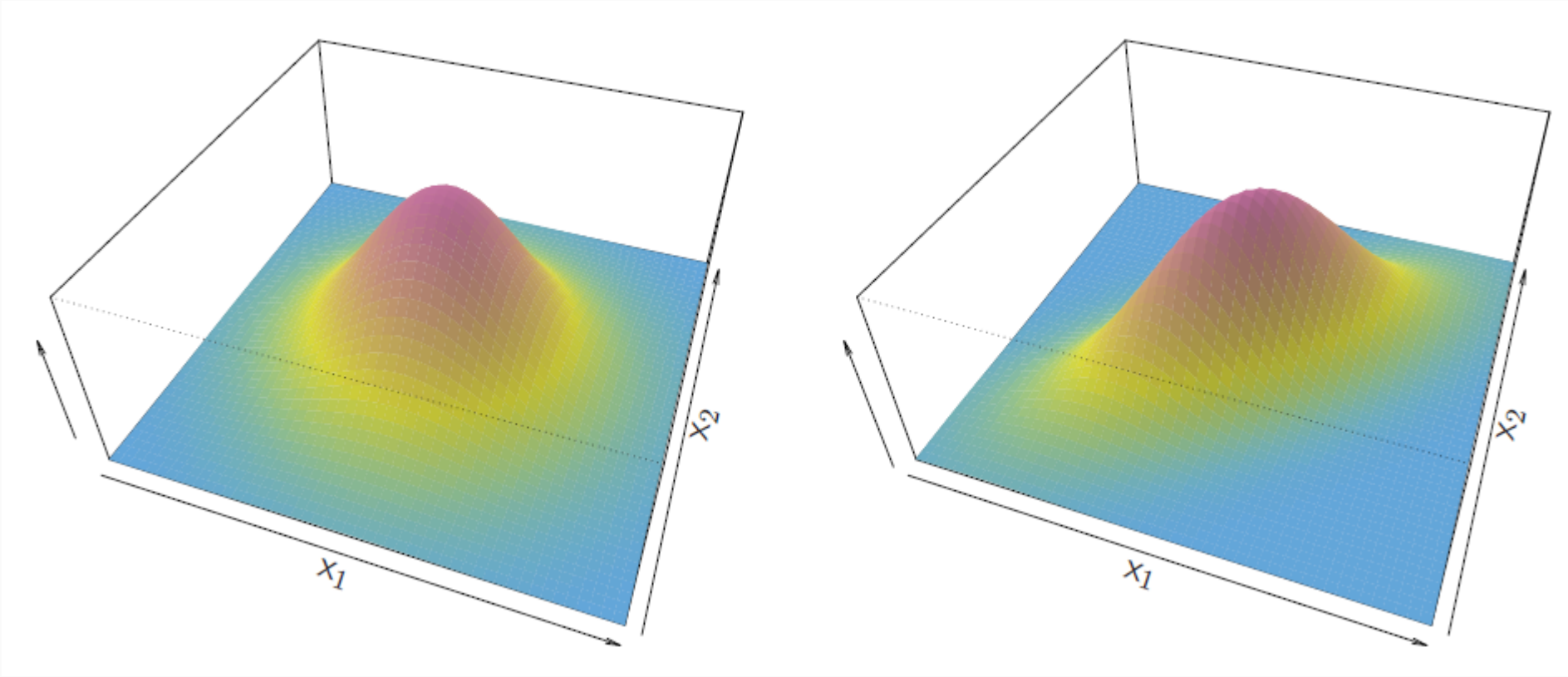
İki grup için farklı normal dağılım yoğunluk fonksiyonları (sol) ve verilerden hareketle oluşturulan histogramlar:



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

Çok değişkenli LDA

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



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

Çok değişkenli LDA

Çoklu Gaussian yoğunluk fonksiyonu.

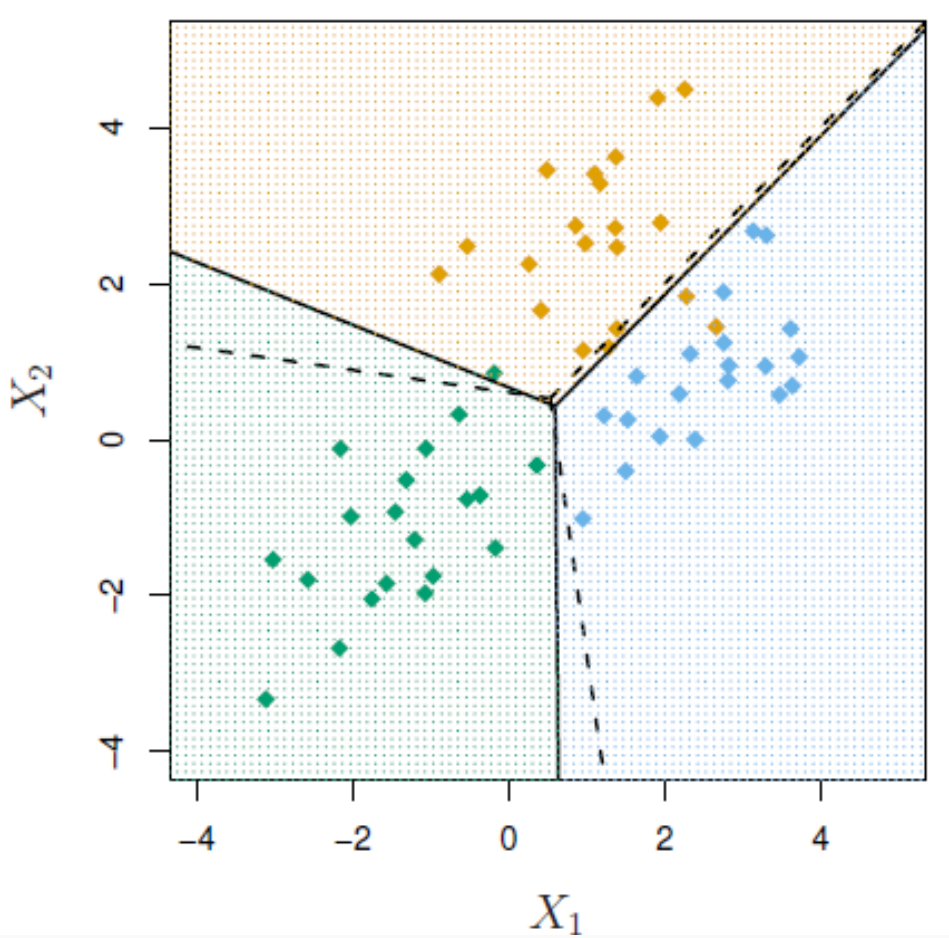
$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{p/2}|\mathbf{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2}(x-\mu)^T \mathbf{\Sigma}^{-1}(x-\mu)\right)$$

$p = 1$ 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**	
		–	+	Toplam
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)

		True default status		
		No	Yes	Total
Predicted default status	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)

		True default status		
		No	Yes	Total
Predicted default status	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 $= \%75.7 = 100 \times 252/333 = 1 - duyarlılık$. 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

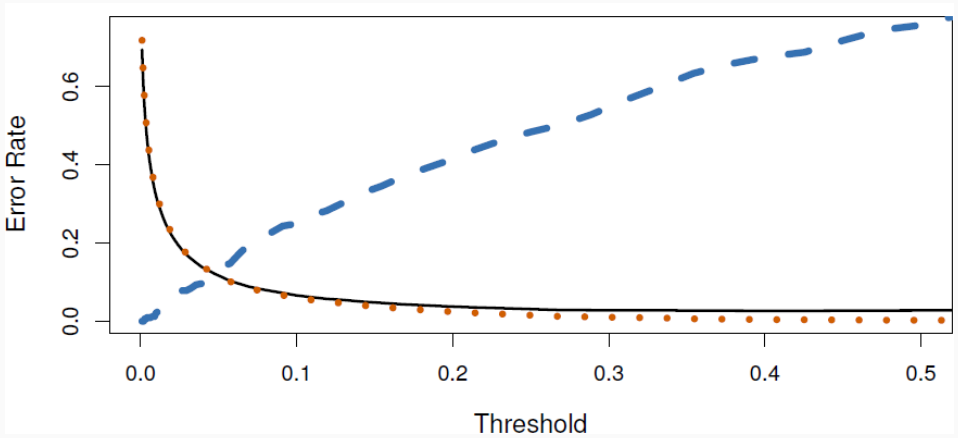
$$Pr(default = YES|X) > 0.2$$

		True default status		
		No	Yes	Total
Predicted default status	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-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

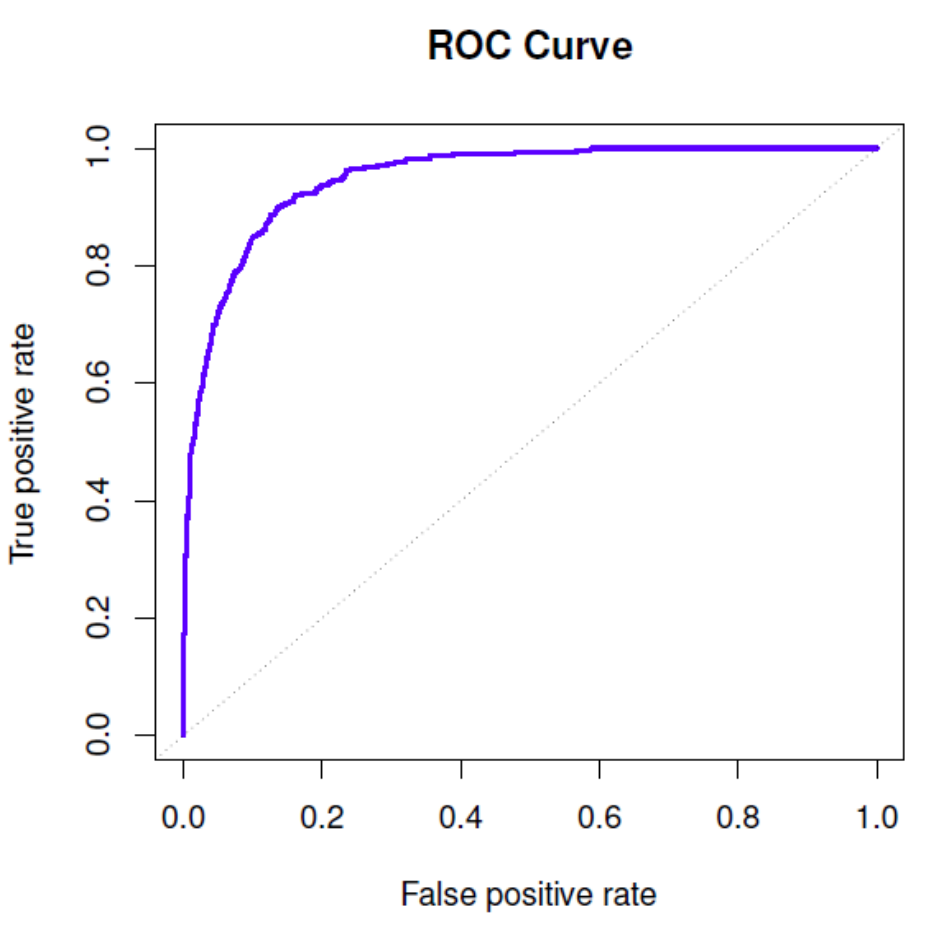


- Yandaki grafikte yatay eksende sınıflamada kullanılan eşik değeri
- Dikey eksen, siyah: genel hata oranı, kavuniçi nokta: yanlış pozitif oranı
- Mavi kesikli çizgi: Yanlış negatif oranı (bocunu ödemedikleri halde yanlışlıkla "borçlu değil" olarak sınıflandırma oranı)

- 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.
- Hangi eşik değerini kullanacağımıza nasıl karar verebiliriz?

ROC Eğrisi

Bu amaçla literatürde ROC eğrisi olarak bilinen "Karar Değerlendirme Eğrisi" kullanılabilir.



- 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.
- Default verileri için AUC = 0.95

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 – Özgüllük (specificity)

Doğru Pozitif Oranı = DP/P = Duyarlılık (sensitivity) = 1 – Tip II Hata Oranı

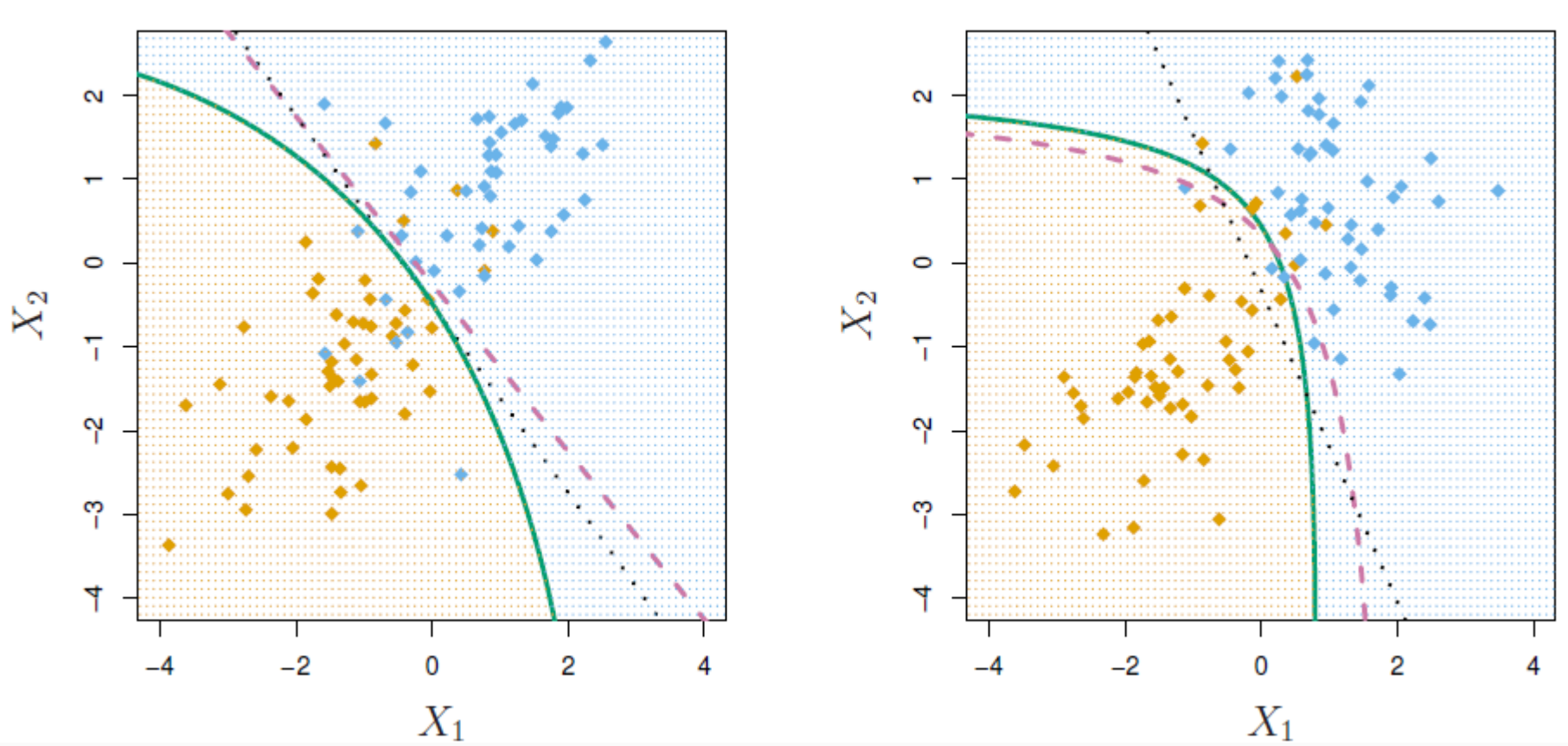
Tip I Hata: H0 Doğru iken RED (gerçekte hasta olmadıkları halde hasta olarak sınıflandırma)

Tip II Hata: H0 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)