

Regresyon, Ridge, Lasso, Capraz Saglama, Regularize Etmek

Konumuz regresyon cesitleri, ve ornek veri olarak diyabet hastaligi olan kisilerden alinmis bazi temel verilerle hastaligin bir sene sonraki ilerleme miktarini kullanilacak. Regresyon sayesinde temel veriler ile hastaligin ilerlemesi arasinda bir baglanti bulunabilir, bu sayede hem veri aciklanir / daha iyi anlasilir (hangi degisken onemlidir, hangisi degildir), hem de baska bir hastanin temel verilerini kullanarak o hastanin diyabetinin bir sene sonra ne olacagini tahmin etmek mumkun olur. Kullanilan temel veriler kisinin yasi, cinsiyeti, vucut kitle endeksi (body mass index) ortalama tansiyonu ve alti kere alinmis kan serum olcumlere dir.

```
from pandas import *
diabetes = read_csv("diabetes.csv",sep=';')
diabetes_y = diabetes['response']
diabetes_x = diabetes.drop("response",axis=1)
diabetes_x_train = diabetes_x[:-20]
diabetes_x_test = diabetes_x[-20:]
diabetes_y_train = diabetes_y[:-20]
diabetes_y_test = diabetes_y[-20:]
```

Ilk once basit regresyonu hatirlayalim (ordinary least regression). Bu teknigi daha once pek cok yonden gorduk. *Lineer Cebir, Çok Degiskenli Calculus* ders notlarinda, ve bizim *Uygulamali Matematik* yazilarinin hepsinde bu teknigin turetilmesi mevcut. Formül

$$\hat{w} = (X^T X)^{-1} X^T y$$

Numerik olarak hemen bu hesabi yapabiliriz. Bir hatirlatma: veri setine y ekseninin nerede kesildigini bulunabilmesi icin suni bir ekstra 'intercept' adli kolon ekleyecegiz, bu kolon iki boyutta $y = ax + c$ formundeki c 'nin bulunabilmesi icindir. Pandas ile bu ekstra kolonu eklemek cok basit, ismen mevcut olmayan kolon erisildigi anda o kolon hemen yoktan yaratilir.

```
import numpy.linalg as la
x_tmp = diabetes_x_train.copy()
x_tmp['intercept'] = 1
xTx = np.dot(x_tmp.T,x_tmp )
ws = np.dot(la.inv(xTx),np.dot(x_tmp.T,diabetes_y_train))
print ws
```

```
[ 3.03499452e-01 -2.37639315e+02  5.10530605e+02  3.27736981e+02
 -8.14131711e+02  4.92814589e+02  1.02848453e+02  1.84606489e+02
  7.43519617e+02  7.60951724e+01  1.52764307e+02]
```

Ayni hesabi bir de `scikit-learn` paketini kullanarak yapalim. Bu paketin `LinearRegression` cagrisi `intercept` isini otomatik olarak hallediyor, eger `intercept` olmasin isteseydik, `fit_intercept=False` diyecektik.

```

from sklearn import linear_model, cross_validation
lin = linear_model.LinearRegression()
lin.fit(diabetes_x_train, diabetes_y_train)
print lin.coef_
print "score", lin.score(diabetes_x_test, diabetes_y_test),

[ 3.03499452e-01 -2.37639315e+02  5.10530605e+02  3.27736981e+02
 -8.14131711e+02  4.92814589e+02  1.02848453e+02  1.84606489e+02
  7.43519617e+02  7.60951724e+01]
score 0.585075302278

```

Sonucular birbirine oldukca yakin. Simdi diger tekniklere geelim.

Sirt Regresyonu (Ridge Regression)

Klasik regresyon ile

$$\hat{w} = \arg \min_w ||y - Xw||^2$$

problemini cozdugumuzu biliyoruz, ki $|| \cdot ||^2$ Oklit normunun karesini temsil ediyor. Fakat bazi durumlarda $X^T X$ 'in tekil (singular) olmasi mumkun ki boyle bir durumda $(X^T X)^{-1}$ 'in tersini almamiz mumkun olmazdi. Tekillik ne zaman ortaya cikar? Eger elimizde veri noktasindan daha fazla boyut var ise mesela... Diyelim ki veri olarak 10 tane kolon var, ama sadece 9 tane veri satiri. Sirt Regresyonunun cikis noktasidir budur.

Fakat ek olarak bu teknik kestirme hesaplarimiza (estimation) bir meyil / yanlilik (bias) eklemek icin de kullanilabilir ve bu meyil tahminlerin / kestirme hesaplarin iyilesmesine faydali olabilir.

Meyili nasil ekleriz? Diyelim ki bizim tanimlayacagimiz bir λ ile tum w 'lerin toplamina bir ust sinir tanimlayabiliriz. Boylelikle regresyonun bulacagi katsayilarin cok fazla buyumesine bir "ceza" getirmis olacagiz, ve bu cezayi iceren regresyon hesabi o cezadan kacinmak icin mecburen bulacagi katsayilari ufak tutacak, hatta bazilarini sifira indirebilecek. Bu azaltmaya istatistikte kuculme (shrinkage) ismi veriliyor.

Sirt regresyonu icin bu kucultme soyle

$$\hat{w}_{sirt} = \arg \min_w (||y - Xw||^2 + \lambda ||w||^2)$$

Goruldugu uzere w 'nin buyuklugunu, bir λ katsayisi uzerinden minimizasyon problemine dahil ettik, boylece diger parametreler ile buyukluk te minimize edilecek. Ustteki tanim siniri tanimlanmamis (unconstrained) bir optimizasyon problemidir. Sinirli olarak

$$\min_w ||y - Xw||^2$$

Su kosula gore (subject to) $\|w\|^2 \leq \tau$

ki λ Lagrange carpanidir. Aslinda simdiye kadar ustteki cevrimin tersini gorduk cogunlukla (yani sinirli problemden sinirsiza gitmeyi), bu gidis tarzini gormek te iyi oldu.

Neyse bastaki sinirsiz problemi cozmek icin ifadenin gradyanini alalim,

$$\nabla(\|y - Xw\|^2 + \lambda\|w\|^2)$$

$$\nabla((y - Xw)^T(y - Xw) + \lambda w^T w)$$

$$\nabla((y^T - w^T X^T)(y - Xw) + \lambda w^T w)$$

$$\nabla(y^T y - y^T Xw - w^T X^T y + w^T X^T Xw + \lambda w^T w)$$

$$-y^T X - X^T y + 2X^T Xw + 2\lambda w$$

$$-2X^T y + 2X^T Xw + 2\lambda w$$

$$2X^T Xw + 2\lambda w - 2X^T y$$

$$2(X^T X + \lambda I)w - 2X^T y$$

Minimizasyon icin ustteki ifadeyi sifira esitleyebiliriz

$$2(X^T X + \lambda I)w - 2X^T y = 0$$

O zaman

$$(X^T X + \lambda I)w = X^T y$$

$$\hat{w} = (X^T X + \lambda I)^{-1} X^T y$$

Bu son ifade en az kareler (least squares) yani normal regresyon cozum formulune cok benziyor, sadece ek olarak bir λI toplama islemi var. Demek ki sirt regresyonunu

kullanmak için zaten yaptığımız hesaba, zaten bizim kendimizin karar verdiği bir λ üzerinden λI eklersek, geri kalan tüm işlemler aynı olacak.

Kontrol edelim

```
lam = 0.2
wridge = np.dot(la.inv(xTx+lam*np.eye(xTx.shape[0])),\
                 np.dot(x_tmp.T,diabetes_y_train))
print wridge
```

```
[ 16.70807829 -179.42288145  447.64999897  285.41866481 -51.7991733
 -75.09876191 -192.46341288  123.61066573  387.91385823  105.53294479
 152.7637018 ]
```

Şimdi scikit-learn ile aynı hesabi yapalım

```
ridge = linear_model.Ridge(alpha=0.2)
ridge.fit(diabetes_x_train, diabetes_y_train)
print ridge.score(diabetes_x_test, diabetes_y_test), ridge.coef_
```

```
0.553680030106 [ 16.69330211 -179.414259    447.63706059  285.40960442 -51.790942
 -75.08327488 -192.45037659  123.60400024  387.91106403  105.55514774]
```

Bir yöntem daha var, bu yöntemle Lasso ismi veriliyor. Lasso'ya göre cezalandırma

$$\sum_{k=1}^n w_k^2 \leq \lambda$$

üzerinden olur. Bu yöntemin tüm detaylarına şimdilik inmeyeceğiz.

Örnek olarak bir λ ile onun bulduğu katsayıları bakalım.

```
lasso = linear_model.Lasso(alpha=0.3)
lasso.fit(diabetes_x_train, diabetes_y_train)
print lasso.coef_
```

```
[ 0.          -0.          497.3407568   199.17441037  -0.          -0.
 -118.89291549   0.          430.93795945   0.          ]
```

Lasso bazı katsayıları sıfıra indirdi! Bu katsayıların ağırlık verdiği değişkenleri, eğer Lasso'ya inanırsak, modelden tamamen atmak mümkündür.

Bu arada Sirt ve Lasso yöntemlerinin metodlarına "regularize etmek (regularization)" ismi de veriliyor.

k-Katlamalı Capraz Sağlama (k-fold Cross-Validation)

Bir yapay öğrenim algoritmasını kullanmadan önce veriyi iki parçaya ayırmak işe yarar; bu parçalar tipik olarak eğitim verisi (training set) diğeri ise test verisi (validation set) olarak isimlendirilir. İsimlerden belli olacağı üzere, algoritma eğitim

seti üzerinde eğitilir; ve başarısı test verisi üzerinden rapor edilir. Bir bakıma modelin oluşturulması bir set üzerindedir, sonra "al şimdi hiç görmediğin bir veri seti, bakalım ne yapacaksın" sorusunun cevabı, sağlaması bu şekilde yapılır.

k-Katlamalı Capraz Sağlama bu iki parçalı eğitim / test kavramını bir adım öteye taşır. Ufak bir k seçeriz, ki bu genellikle 5 ila 10 arasında bir sayı olur, ve tüm verimizi rasgele bir şekilde ama k tane ve esit büyüklükte olacak şekilde parçalara ayırırız. Bu parçalara "katlar (folds)" ismi verilir bazen (ki isim buradan geliyor). Sonra teker teker her parçayı test verisi yaparız ve geri kalan tüm parçaları eğitim verisi olarak kullanırız. Bu işlemi tüm parçalar için tekrarlarız.

Bu yaklaşım niye faydalıdır? Çünkü veriyi rasgele şekillerde bölüp, pek çok yonden eğitim / test için kullanınca verinin herhangi bir şekilde bizi yönlendirmesi / aldatması daha az mümkün hale gelir.

Ve iste bu özelliği, ek olarak, capraz sağlamayı "model seçmek" için vazgeçilmez bir araç haline getirir.

Model seçmek nedir? Model seçimi üstteki bağlamda optimal bir λ bulmaktır mesela, yani her modeli temsil eden bir λ var ise, en iyi λ 'yi bulmak, en iyi modeli bulmak anlamına geliyor, capraz sağlama bunu sağlıyor. Capraz sağlama için `scikit-learn`'un sağladığı fonksiyonlar vardır, önce katları tanımlarız, sonra bu değiştirilmiş regresyon fonksiyonlarına katlama usulünü geçeriz.

```
k_fold = cross_validation.KFold(n=420, n_folds=7)
```

Katları üstteki gibi tanımladık. 420 tane veri noktasını 7 kata böl dedik. Şimdi bu katları kullanalım,

```
ridge_cv = linear_model.RidgeCV(cv=k_fold)
ridge_cv.fit(np.array(diabetes_x), np.array(diabetes_y))
print ridge_cv.alpha_
```

0.1

Üstteki sonuç $\lambda = 0.1$ 'i gösteriyor. Bu λ daha optimalmiş demek ki. Lasso için benzer şekilde

```
lasso_cv = linear_model.LassoCV(cv=k_fold)
print lasso_cv.fit(diabetes_x, diabetes_y)

LassoCV(alphas=None, copy_X=True,
         cv=sklearn.cross_validation.KFold(n=420, n_folds=7), eps=0.001,
         fit_intercept=True, max_iter=1000, n_alphas=100, normalize=False,
         precompute=auto, tol=0.0001, verbose=False)
```

```
print lasso_cv.alpha_
```

0.00283958719118

```
print lasso_cv.score(diabetes_x_test, diabetes_y_test)
0.597090337358
```

Simdi veri setinin bir kısmi uzerinde teker teker hangi algoritmanin daha basarili oldugunu gorelim.

```
def predict(row):
    j = row; i = row-1
    new_data = diabetes_x[i:j]
    print diabetes_y[i:j], "lasso",lasso_cv.predict(new_data), \
          "ridge",ridge_cv.predict(new_data), \
          "linear",lin.predict(new_data)
```

```
predict(-2) # sondan ikinci veri satiri
```

```
predict(-3)
```

```
predict(-4)
```

```
predict(-5)
```

```
predict(-8)
```

```
439    132
```

```
Name: response, dtype: int64 lasso [ 122.2361344] ridge [ 127.1821212] linear [ 123.5]
```

```
438    104
```

```
Name: response, dtype: int64 lasso [ 101.85154189] ridge [ 108.89678818] linear [ 104.5]
```

```
437    178
```

```
Name: response, dtype: int64 lasso [ 192.95670241] ridge [ 189.58095011] linear [ 178.5]
```

```
436     48
```

```
Name: response, dtype: int64 lasso [ 52.8903924] ridge [ 57.66611598] linear [ 52.5]
```

```
433     72
```

```
Name: response, dtype: int64 lasso [ 60.42852107] ridge [ 66.3661042] linear [ 61.1]
```

Ustteki sonuclara gore gercek degeri 132 olan 439. satirda lasso 122.2, sirt (ridge) 127.1, basit regresyon ise 123.5 bulmus. O veri noktası için sirt yontemi daha basarili cikti.

Sonuclara bakınca bazen sirt, bazen normal regresyon basarili cikiyor. Hangi yontem kazanmis o zaman? Bir o, o bir bu ondeyse, hangi yontemi kullanacagimizi nasıl bilecegiz?

Aslında her seferinde tek bir metodu kullanmak gerekmiyor. Bu metodları bir takım (ensemble) halinde isletebiliriz. Her test noktasını, her seferinde tüm metotlara sorarız, gelen sonucların mesela.. ortalamasını alırız. Bu şekilde tek başına isleyen tüm metotlardan tutarlı olarak her seferinde daha iyi sonuca ulaşacak bir sonuc elde edebiliriz. Zaten Kaggle gibi yarışmalarda çoğunlukla birinciliği kazanan metotlar bu türden takım yöntemlerini kullanan metotlar, mesela Netflix yarışmasını kNN ve SVD metotlarını takım halinde isleten bir grup kazandı.

Kaynaklar

www.lx.it.pt/~mtf/Figueiredo_Linear_Regression.pdf

www.cs.nyu.edu/~mohri/mls/lecture_8.pdf

Harrington, P., *Machine Learning in Action*

Shalizi, C., Data Analysis from an Elementary Point of View