Hafta 03/04 - Uzaklık/Benzerlik - En Yakın Komşular - Karar Ağaçları

BGM 565 - Siber Güvenlik için Makine Öğrenme Yöntemleri Bilgi Güvenliği Mühendisliği Yüksek Lisans Programı

> Dr. Ferhat Özgür Çatak ozgur.catak@tubitak.gov.tr

İstanbul Sehir Üniversitesi 2018 - Bahar



- Regularization
 - Detay
 - Neden Katsayıların Büyüklüğünü Cezalandırıyoruz?
 - Lab
- Uzaklık ve Benzerlik
 - Uzaklık
 - Farklı Uzaklık Ölçümleri

- Benzerlik Ölçümleri
- kNN Yöntemi
 - Giriş
 - kNN Yöntemi
 - Karar Sınırları
 - Ağırlıklı kNN
 - Karar Ağaçları
 - Giriş
 - Çok Sınıflı Sınıflandırma
 - Ağacın Oluşturulması

- Regularization
 - Detay
 - Neden Katsayıların Büyüklüğünü Cezalandırıyoruz?
 - Lab
- - Uzaklık
 - Farklı Uzaklık Ölcümleri

- Benzerlik Ölçümleri
- Giris
 - kNN Yöntemi
 - Karar Sınırları
- Ağırlıklı kNN
- Karar Ağaçları
 - Giris
 - Çok Sınıflı Sınıflandırma
 - Ağacın Olusturulması

Regularization - Detay I

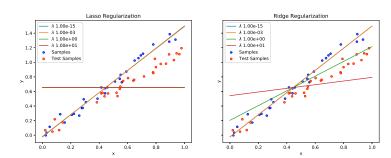
Regularization

Ridge ve Lasso regresyonu, genellikle yüksek sayıda özniteliğin (feature, column v.s.) olduğu durumlarda model (hipotez) oluşturulmasında kullanılan güçlü tekniklerdir. Burada yüksek, genellikle iki konudan birini ifade etmektedir:

- Bir modelin aşırı öğrenme eğilimini arttırmak için yeterince yüksek sayıda (10 değişken bile aşırı öğrenmeye neden olabilir)
- Hesaplama zorluklarına neden olacak kadar büyük. Modern sistemlerde, bu durum milyonlarca veya milyarlarca özellikte ortaya çıkabilir.

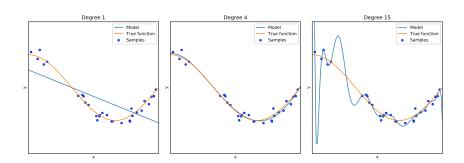
Regularization: Tahmin ve gerçek gözlemler arasındaki hatayı en aza indirgeyerek, özellik katsayılarının büyüklüğünü cezalandırarak çalışırlar.

Regularization - Detay II



Şekil: Farklı λ değerleri için lasso ve ridge regularization

Regularization - Detay III



Şekil: Aşırı Öğrenme

Neden Katsayıların Büyüklüğünü Cezalandırıyoruz?

Regularization

000000

- ► Eski maliyet fonksiyonu $C = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^{m} \left(h(x^{(i)}) y^{(i)} \right)^2$
 - MSE (Mean Square Error) değerinin azaltılması tek hedeftir.
 - ▶ Bu nedenle, MSE düşürmek için ağırlık değerleri herhangi bir değer alabilir.
 - Ağırlıkların yüksek olması ezberlemeye (overfit) neden olabilir.
- Cözüm: Sadece MSE düsürülmemeli aynı zamanda ağırlıklar cok vüksek olmamalıdır.
- ► Yeni maliyet fonksiyonu $C = \frac{1}{2m} \left(\sum_{i=1}^m \left(h(x^{(i)}) y^{(i)} \right)^2 + \lambda \sum_{j=1}^n w_j^2 \right)$
 - λ: regularization ifadesinin değerini ayarlamak için kullanılmaktadır. n değeri öznitelik sayısıdır.
 - λ değeri cok düsükse, maliyet sadece coğunlukla MSE've bağımlıdır.
 - λ değeri cok büyükse ağırlıklar oldukça düsük değerler olacaktır.

00000 Lab

Regularization

Lab Uygulaması 1 ve 2

İçindekiler

- - Neden Katsayıların
 - Lab
- Uzaklık ve Benzerlik
 - Uzaklık
 - Farklı Uzaklık Ölcümleri

Benzerlik Ölçümleri

- - Giris
 - kNN Yöntemi
 - Karar Sınırları
 - Ağırlıklı kNN Karar Ağaçları
 - Giris
 - Çok Sınıflı Sınıflandırma
 - Ağacın Olusturulması

Uzaklık I

 Kümeleme ve sınıflandırma olmak üzere iki örneğin birbirlerine olan uzaklık ve benzerlikleri kullanılmaktadır.

Uzaklık

Uzaklık: X kümesindeki bir metrik. (**uzaklık fonksiyonu** veya sadece **uzaklık** adlandırılır).

$$d: X \times X \to \mathbb{R} \to [0, \infty)$$

 \mathbf{x} , \mathbf{y} , $\mathbf{z} \in X$ gibi X kümesinden alınacak örnekler için uzaklık olarak $[0,\infty)$ şeklinde skaler sonuçlar üretir. Aşağıdaki koşullar yerine getirir:

- ► $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \ge 0$, iki örneklem arasında uzaklık pozitiftir.
- $d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{y}$ iki örneklem arasında uzaklık 0 ise bu iki örneklem aynıdır.
- $ightharpoonup d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = d(\mathbf{y}, \mathbf{x})$, Uzaklıklar simetriktir.
- ▶ $d(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \leq d(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + d(\mathbf{x}, \mathbf{z})$ Üçgen eşitsizliği

Alternatif olarak uzaklık d, norm N olarak ifade edebiliriz.

$$d(\mathbf{x},\mathbf{y}) = N(\mathbf{x} - \mathbf{y})$$



Uzaklık Matrisi

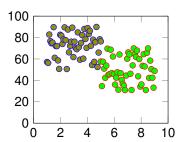
m adet satır ve *n* adet özniteliğe sahip veri kümesi $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ için uzaklık matrisi $\mathcal{R} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ şeklinde tanımlanır.

$$\mathcal{R} = egin{bmatrix} 0 & d_{12} & \dots & d_{1m} \ d_{21} & 0 & \dots & d_{2m} \ dots & dots & \ddots & dots \ d_{m1} & d_{m2} & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Uzaklık III

Uygulama

Örnekler (satırlar, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n, n \geq 1$) arasında benzerliği birbirlerine olan yakınlık olarak tanımlayabiliriz.



Karar Ağaçları

Farklı Uzaklık Ölçümleri I

Regularization

Uzaklık Ölçümleri - Minkowski Uzaklığı

$$d_{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = ||\mathbf{x} - \mathbf{y}||_{\rho} = \left(\sum_{k=1}^{n} |\mathbf{x}_{k} - \mathbf{y}_{k}|^{\rho}\right)^{\frac{1}{\rho}}$$
(1)

- p = 1: **Manhattan** uzaklığı (L_1 -Norm, Taxicab veya City-Block)
- \triangleright p = 2: Öklid uzaklığı (L₂-Norm veya Ruler)
- ▶ $p \to \infty$: **Chebyshev** uzaklığı (L_{max} -Norm, maximum metric)

 - Örnek:

$$\mathbf{x} = [0, 3, 4, 5]$$

 $\mathbf{v} = [7, 6, 3, -1]$

$$d_{Chebyshev}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 7$$

Benzerlik Ölçümleri I

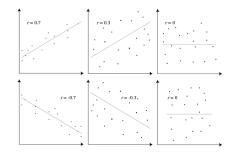
Tanım

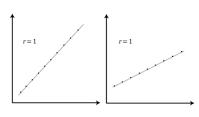
- ► Pearson korelasyon katsayısı, *X* ve *Y* iki değişkeni arasındaki doğrusal korelasyonun bir ölçütüdür.
- Öznitelikler arasında bulunan benzerlik derecesini hesaplamada kullanılır.
- ightharpoonup [-1, +1] aralığında yer alırlar.

Pearson Correlation

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sum_{k=1}^{n} (x_k - \overline{x})(y_k - \overline{y})}{\sqrt{\sum_{k=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2} \sqrt{\sum_{k=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2}}$$
(2)

Benzerlik Ölçümleri II Pearson Correlation





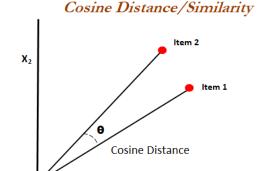
Regularization

Kosinüs Benzerliği

- lki vektör arasında bulunan açı farkını kullanan benzerlik ölçümü.
- Açı 0 ise kosinüs değeri 1 olacaktır. Diğer durumlarda 1'den küçük olacaktır.
- Kullanım alanı:
 - Döküman benzerlikleri
 - Multimedia kıyaslamaları
 - Arama motorları v.s.

$$cos(\theta) = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{a}_{i} \mathbf{b}_{i}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{a}_{i}^{2}} \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \mathbf{b}_{i}^{2}}}$$
(3)

Kosinüs Benzerliği II



 X_1

Kosinüs Benzerliği III

Örnek

$$\mathbf{a} = [1, 6] \ \mathbf{b} = [3, 5]$$

$$\|\boldsymbol{a}\| = \sqrt{1^2 + 6^2} = 6.08 \ \|\boldsymbol{b}\| = \sqrt{3^2 + 5^2} = 5.83$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 1 \times 3 + 6 \times 5 = 33$$

$$cos(\theta) = \frac{33}{6.08 \times 5.83} = 0.93$$



Kategorik Değişkenler I

Regularization

Kategorik Değişkenler

Öznitelikerin temsili amacıyla söz konusu özelliğin varlığı/yokluğu (Var/Yok, True/False) ile ifade edilmesi

Hamming Uzaklığı

► Tanım: $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m \mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ olsun. $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ için

$$d_{hamming}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{m} (\mathbf{x}_{i} XOR \mathbf{y}_{i})$$

$$d(00111, 11001) = 4 \frac{d}{d}(0122, 1220) = 3$$
(4)

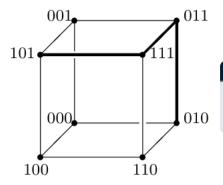
Örnekler:

$$d(00111, 11001) = 4 \stackrel{i=1}{d}(0122, 1220) = 3$$

 $d('karolin', 'kathrin') = 3$



Kategorik Değişkenler II



İkili alfabe Hamming uzaklığı

Kelimeler (\mathbb{R}^3) üç boyutlu bir küpün köşeleri olarak temsil edilebilir.

000,001,010,011,100101,110,111

Kategorik Değişkenler III

Jaccard Benzerliği

- Jaccard benzerliği, hangi üyelerin paylaşıldığını, hangilerinin farklı olduğunu görmek için iki kümeyi karşılaştırmaktadır.
- ► Benzerlik ölçüsü aralığı: [0,1]
- ► Jaccard = (the number in both sets) / (the number in either set) * 100
- $J(X,Y) = \frac{|X \cap Y|}{|X \cup Y|}$
- Örnek:

$$A = \{0, 1, 2, 5, 6\}$$

$$B = \{0, 2, 3, 4, 5, 7, 9\}$$

$$J(A, B) = \frac{|A \cap B|}{|A \cup B|} = \frac{|\{0, 2, 5\}|}{|\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 9\}|} = \frac{3}{9} = 0.33$$

▶ Jaccard uzaklığı: $d_{iaccard}(A, B) = 1 - J(A, B)$

Lab Uygulaması 3

Dogularization

- Detay
- Neden Katsayıların Büyüklüğünü Cezalandırıyoruz?
- Lab
- Uzaklık ve Benzerlik
 - Uzaklık
 - Farklı Uzaklık Ölçümleri

- Benzerlik Ölçümleri
- kNN Yöntemi
 - Giriş
 - kNN Yöntemi
 - Karar Sınırları
 - Ağırlıklı kNN
- Karar Ağaçları
 - Giriş
 - Çok Sınıflı Sınıflandırma
 - Ağacın Oluşturulması

Giris

lki değişkenin benzerliği ve uzaklığı çeşitli yöntemlerle (Öklid, Hamming, Jaccard, Pearson gibi) hesaplanabilmektedir.

kNN Yöntemi

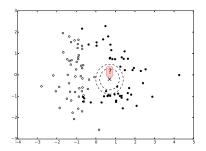
- ► Bu yöntemler kullanılarak **Voronoi** mozaikleriyle **karar sınırları** tanımlanabilmektedir.
- ▶ Voronoi: Düzlemin belirli bir alt kümesindeki noktalara olan uzaklığa bağlı olarak bir düzlemin bölgelere ayrılmasıdır.

k-En Yakın Komşu Yöntemi I

k-Nearest-Neighbor (kNN)

kNN

- En basit sınıflandırma algoritmalarından bir tanesidir.
- Bir test örneği ile belirtilen eğitim örnekleri arasındaki uzaklığa dayanır.



k-En-Yakın komşu algoritması

kNN Yöntemi

- En basit sınıflandırma yöntemi
- Örnek tabanlı: Bir öğrenme aşaması yok. Bunun yerine bütün örnekleri hatırlayarak yeni örneğin sınıfını uzaklıkları kullanarak hesaplamaktadır.

k-En Yakın Komşu Yöntemi II

k-Nearest-Neighbor (kNN)

kNN Nasıl Çalışır?

- ▶ k adet en yakın komsunun sahip olduğu sınıf etiketi kullanılarak gözlemin sınıfı belirlenir.
- ► Uzaklık ölçümü (d(x,y)) için genellikle Öklid (Euclidean) uzaklığı kullanılır.
- ► En yakın komşu:
 - eğer bilinmeyen örnek $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$ için eğitim veri kümesinde $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ bulunan örneklerin (satırların) uzaklıklarına göre artan sırada sıralayalım.

$$d_1(\mathbf{x}) \leq d_2(\mathbf{x}) \leq \cdots \leq d_m(\mathbf{x})$$

kNN Yöntemi

▶ d₁ ifadesi en yakın örneğe olan uzaklık, d₂ ifadesi ikinci en yakın örneğe olan uzaklığı ifade etmektedir.

Formal Tanım

- ▶ positif tamsayı K, gözlemlenen örnek **x** ve benzerlik metriği d olmak üzere, kNN aşağıda yer alan 2 adımı gerçekleştirir.
 - ▶ Bütün veri kümesi, D, üzerinde bulunan örnekler (satırlar, gözlemler v.b.) ile sınıf etiketi bilinmeyen \mathbf{x} arasında d hesaplanır.

kNN Yöntemi

► Her bir sınıf için sartlı olasılık hesaplanarak, en yüksek olasılığa sahip sınıf etiketi x gözlemine atanmaktadır.

$$P(y = j | X = \mathbf{x}) = \frac{1}{K} \sum_{i \in \mathcal{A}} I(y^{(i)} = j)$$

1: Indicator function, doğru ise 1 diğer durumda 0.

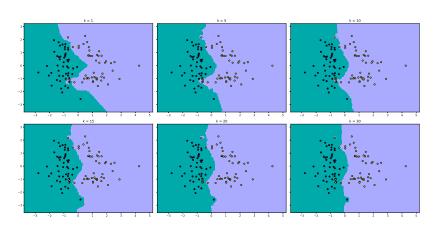
kNN'yi anlamak icin alternatif bir yol: yeni noktaları sınıflandırmak icin kullanılan bir karar sınırını hesaplamak olarak düşünülebilir.

Table: KDDCUP'99 veri kümesinden alınmış 10 örneğin birbirlerine olan öklid uzaklıkları.

	<i>x</i> ₀	<i>x</i> ₁	<i>x</i> ₂	х3	<i>x</i> ₄	<i>x</i> 5	<i>x</i> ₆	<i>x</i> 7	<i>x</i> 8	<i>x</i> 9
<i>x</i> ₀	0.00	1314.42	0.00	1.41	849.42	0.00	2022.72	1172.66	1188.98	9325.94
x ₁	1314.42	0.00	1314.42	1313.68	842.25	1314.42	960.09	268.17	871.97	8500.60
X ₂	0.00	1314.42	0.00	1.41	849.42	0.00	2022.72	1172.66	1188.98	9325.94
x ₃	1.41	1313.68	1.41	0.00	848.22	1.41	2022.23	1171.83	1188.38	9325.83
x ₄	849.42	842.25	849.42	848.22	0.00	849.42	1564.92	738.86	1031.45	8962.28
x ₅	0.00	1314.42	0.00	1.41	849.42	0.00	2022.72	1172.66	1188.98	9325.94
<i>x</i> ₆	2022.72	960.09	2022.72	2022.23	1564.92	2022.72	0.00	1228.09	1775.06	7540.70
x ₇	1172.66	268.17	1172.66	1171.83	738.86	1172.66	1228.09	0.00	649.59	8768.61
<i>x</i> ₈	1188.98	871.97	1188.98	1188.38	1031.45	1188.98	1775.06	649.59	0.00	9272.38
x ₉	9325.94	8500.60	9325.94	9325.83	8962.28	9325.94	7540.70	8768.61	9272.38	0.00

kNN Yöntemi

000000000



Şekil: kNN karar sınırları



Lab Uygulaması - 4

kNN Yöntemi

000000000

Ağırlıklı kNN

- ➤ Yöntem: sınıf etiketi bilinmeyen örneklem x için yakınında bulunan örneklerin uzaklıklarına göre ağırlıklandırılması yöntemidir.
- Bu amaçla uzaklık bir benzerlik ölçüsü olarak kullanılır. Yakın olan noktaların ağırlıkları daha yüksek olmalıdır.

$$P(y = j | X = \mathbf{x}) = \frac{1}{K} \sum_{i \in A} \frac{1}{d(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)} I(y^{(i)} = j)$$

Python

class sklearn.neighbors.KNeighborsClassifier(n_neighbors=5,
weights='uniform', algorithm='auto', leaf_size=30, p=2,
metric='minkowski', metric_params=None,n_jobs=1, **kwargs)

- - Neden Katsayıların
 - Lab
- - Uzaklık
 - Farklı Uzaklık Ölcümleri

- Benzerlik Ölçümleri
- - Giris
 - kNN Yöntemi
 - Karar Sınırları
 - Ağırlıklı kNN
- Karar Ağaçları
 - Giriş
 - Çok Sınıflı Sınıflandırma
 - Ağacın Olusturulması

Karar Ağaçları I

Hiyerarşik Öğrenme

- Tek Aşamalı Sınıflandırıcılar
 - Tek bir işlem kullanarak (doğrusal regresyon, lojistik regresyon) bir x örneklemine sınıf etiketi ataması yaparlar.
 - Bütün sınıflar için tek bir öznitelik kümesi kullanılmaktadır.
 - Özniteliklerin nominal olma durumu.
- Hiyerarşik Sınıflandırıcılar
 - Birden çok ardışık test

Karar Ağaçları II

Nominal Veri

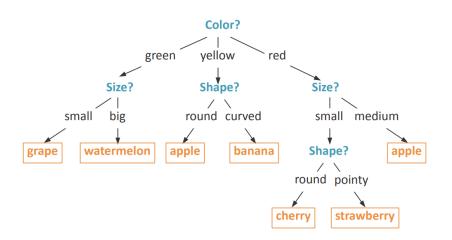
Öznitelikler

- Ayrık (Discrete)
- ► Herhangi bir sıralama/benzerlik kavramı yok
- Metrik olmayan öğrenme (Non-metric learning)

Örnekler:

Protocol type: TCP, UDP
 Service: http, mail, ftp, ssh
 Flags: SYN, ACK, RST, FIN

Karar Ağaçları III



Cok Sınıflı Sınıflandırma

Multiclass classification

Çok Sınıflı Sınıflandırma

- Bire-karşı-hepsi (One-versus-all)
 - K adet sınıflandırıcı (hipotez, model) oluştur, oylama ile x etikietini bul
- Bire-karşı-bir (One-versus-one):
 - ► K(K-1)/2 adet sınıflandırıcı (hipotez, model) oluştur, oylama ile x etikietini bul
- Coklu sınıfları isleyen bir algoritma kullanımı:
 - Karar ağaçları
 - Yapay Sinir ağları

Ağacın Oluşturulması I

Giriş

- Monothetic ağaçlarda (her bir node üzerinde sadece bir öznitelik olması) karar sınırları axis'lere ortagonal yapıdadır.
- Ayrıştırma değişkeni (j) ve ayrıştırma noktaları 2 bölge tanımlamaktadır.
- ▶ j ve s değerleri saf olmamayı (Impurity) azaltacak şekilde seçilmelidir.
 - ► Niteliklerin kategorik olması durumunda: Bilgi Kazanımı
 - Niteliklerin sürekli olması durumunda: **Gini index** $Gini = 1 \sum_{i=1}^{c} (p_i)^2$

Formal Tanım

- ▶ Eğitim vektörleri $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^n, i = 1, \cdot, m$ ve sınıf vektörü $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ olsun.
- Karar ağacı algoritması, girdi uzayını aynı etiketlere sahip örneklere göre parçalamaktadır.
- Amaç: Impurity minimize etmek için öznitelikler seçilir.

$$\min_{j} \left(\frac{|R_1(j)|}{n_{total}} \times Imp(R_1(j)) + \frac{|R_2(j)|}{n_{total}} \times Imp(R_2(j)) \right)$$
 (5)



Ağacın Oluşturulması II

Bilgi Kazanımı (Information Gain)

► Rassal bir değişken X belirsizliği/rassallığı **Entropi** ile ölçülür.

$$H(X_n) = -\sum_k p_k \log_2(p_k)$$
 (6)

 p_k ifadesi, X_n içinde yer alan eğitim örneklerinin k sınıfına ait olanlarının oranıdır.

- ▶ İkili sınıflandırma problemi (-1, +1):
 - Bütün örneklerin sınıf etiketi aynı ise Entropi 0. Düşük Entropi.

$$\mathbf{y} = \{-1, -1, \cdots, -1\}$$
 veya $\mathbf{y} = \{+1, +1, \cdots, +1\}$

▶ Bütün örneklerin yarısının sınıf etiketi −1 diğer yarısı +1 aynı ise Entropi 1. Yüksek Entropi

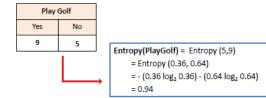


Şekil: Örnek verikümesi 1

Ağacın Oluşturulması IV

Bağımlı Değişken Entropy Değeri

$$E(S) = \sum_{i=1}^{c} -p_i \log_2 p_i$$



Bağımsız Değişken (Outlook) Entropy Değeri

$$E(T,X) = \sum_{c \in X} P(c)E(c)$$

		Play Golf		
		Yes	No	
Outlook	Sunny	3	2	5
	Overcast	4	0	4
	Rainy	2	3	5
	•			14
		•		

E(PlayGolf, Outlook) =
$$P(Sunny)*E(3,2) + P(Overcast)*E(4,0) + P(Rainy)*E(2,3)$$

= $(5/14)*0.971 + (4/14)*0.0 + (5/14)*0.971$
= 0.693

Ağacın Oluşturulması VI

Bilgi Kazanımı (Information Gain)

Bilgi kazancı, bir veri kümesinin bir öznitelik üzerine bölünmesinden sonra Entropi azalmasına dayanmaktadır.

		Play Golf		
		Yes	No	
	Sunny	3	2	
Outlook	Overcast	4	0	
	Rainy	2	3	
Gain = 0.247				

		Play Golf		
		Yes	No	
Humidity	High	3	4	
numidity	Normal	6	1	

Gain = 0.152

		Play Golf		
		Yes	No	
	Hot	2	2	
Temp.	Mild	4	2	
	Cool	3	1	
Gain = 0.029				

		Play Golf		
		Yes	No	
M5-4-	False	6	2	
Windy	True	3	3	
Gain = 0.048				

Gain(T, X) = Entropy(T) - Entropy(T, X)

G(PlayGolf, Outlook) = E(PlayGolf) - E(PlayGolf, Outlook)= 0.940 - 0.693 = 0.247



Ağacın Oluşturulması VII

En yüksek bilgi kazanımı olan öznitelik (Outlook), karar düğümü olarak seçilir.



Ağacın Oluşturulması VIII

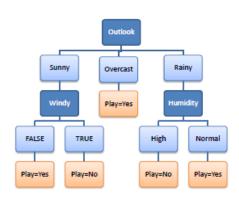
R₁: IF (Outlook=Sunny) AND (Windy=FALSE) THEN Play=Yes

R₂: IF (Outlook=Sunny) AND (Windy=TRUE) THEN Play=No

R₃: IF (Outlook=Overcast) THEN Play=Yes

R₄: IF (Outlook=Rainy) AND (Humidity=High) THEN Play=No

R₅: IF (Outlook=Rain) AND (Humidity=Normal) THEN Play=Yes



¹ http://www.saedsayad.com/decision_tree.htm