

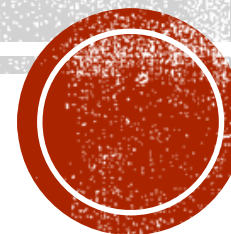
# 類神經網路\_W3

授課教師: 郭至恩 助理教授

資訊大樓 404室

E-mail: [cekuo@nchu.edu.tw](mailto:cekuo@nchu.edu.tw)

Office hours: 星期一 13:00-16:00



# 評估結果

## ■ 分類指標

- 混淆矩陣：混淆矩陣能更進一步幫助我們理解預測模型成功與失敗之處。

		預測	
		將會購買	不會購買
真實情況	實際購買	1（真陽）	5（偽陰）
	不曾購買	5（偽陽）	89（真陰）

# 評估模型

- 混淆矩陣 來評估模型

		True condition	
		Condition positive	Condition negative
Predicted condition	Predicted condition positive	True positive, Power	False positive, Type I error
	Predicted condition negative	False negative, Type II error	True negative

$$\text{準確率} = \frac{\sum \text{True positive} + \sum \text{True negative}}{\sum \text{Total population}}$$

$$\text{靈敏度} = \frac{\sum \text{True positive}}{\sum \text{Condition positive}}$$

$$\text{特異性} = \frac{\sum \text{True negative}}{\sum \text{Condition negative}}$$

# 系統效能驗證

整體一致性(overall agreement)、各類別的靈敏度(sensitivity, SE)、特異度(specificity, SP)、正預測值(positive predictive value, PPV)、負預測值(Negative predictive value, NPV)

- 混淆矩陣(Confusion matrix)
- Kappa係數
  - Statistical measure of inter-rater agreement among two or more raters
  - less than 0.00 indicate poor agreement
  - 0.00 to 0.20 indicate slight agreement
  - 0.21 to 0.40 indicate fair agreement
  - 0.41 to 0.60 indicate moderate agreement
  - 0.61 to 0.80 indicate substantial agreement
  - more than 0.80 indicates excellent agreement

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

公開資料庫測試比較結果

# 整體一致性(overall agreement)

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<del>1029</del>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<del>134</del>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<del>5833</del>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<del>2068</del>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<del>2703</del>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

對多類別分類問題的效能評估須注意樣本比例!!!  
感覺上有改善 其實整體而言效能下降

# 靈敏度(sensitivity, SE)

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

# 特異度 (specificity, SP)

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<del>1029</del>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	<del>55</del>	<del>134</del>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

# 正預測值(positive predictive value, PPV)

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					



# 負預測值(Negative predictive value, NPV)

Wake NPV ?

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

S1 NPV ?

		Computer					
		Wake	S1	S2	SWS	REM	SE(%)
Expert	Wake	<b>1029</b>	49	28	0	45	89.4
	S1	55	<b>134</b>	108	2	208	26.43
	S2	18	81	<b>5833</b>	443	174	89.06
	SWS	3	11	257	<b>2068</b>	9	88.06
	REM	42	45	134	23	<b>2703</b>	91.72
	Overall						<b>87.15</b>
	Kappa	0.81					

Wake NPV=紅色虛線區塊/藍色區塊

S1 NPV=紅色虛線區塊/藍色區塊

# kappa一致性係數 ( K coefficient of agreement ; K )

一般Kappa公式

$$K = \frac{P_o - P_c}{1 - P_c}$$

$P_o$  = 實際觀測一致的百分比(observed agreement) :  
前後或兩者測驗的結果，一致的機率

$P_c$  = 理論期望一致性的百分比(chance agreement) :  
前後或兩種測驗結果，預期相同的機率

## kappa一致性係數 ( K coefficient of agreement ; K )

---

兩位教授評分39個申請入學徵試者書面資料是否符合入學標準，求其Kappa值並說明是否具一致性...

評分結果敘述如下：

教授1與教授2皆認定合格的有22位；

教授1與教授2皆認定不合格的有11位；

教授1認為合格但教授2認定不合格的有4位；

教授1認為不合格但教授2認定合格的有2位

# kappa一致性係數 ( K coefficient of agreement ; K )

依文字敘述可得一列聯表格

教授1 教授2	合格	不合格	邊際總和
合格	22	2	24
不合格	4	11	15
邊際總和	26	13	39

$$P_o = \frac{22 + 11}{39} = 0.8462$$

$$P_c = \frac{\left[ \frac{26 \times 24}{39} \right] + \left[ \frac{13 \times 15}{39} \right]}{39} = 0.5385$$

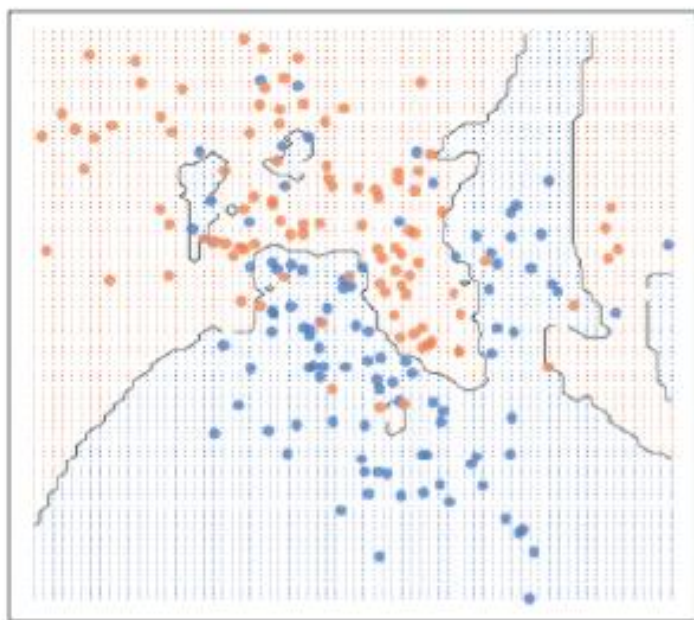
$$K = \frac{P_o - P_c}{1 - P_c}$$

↓

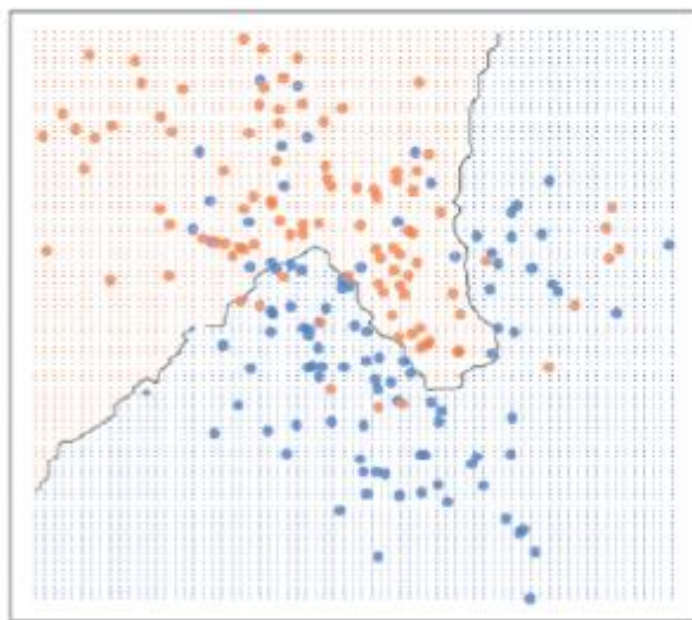
$$K = \frac{0.8462 - 0.5385}{1 - 0.5385} = 0.67$$

# 調整參數

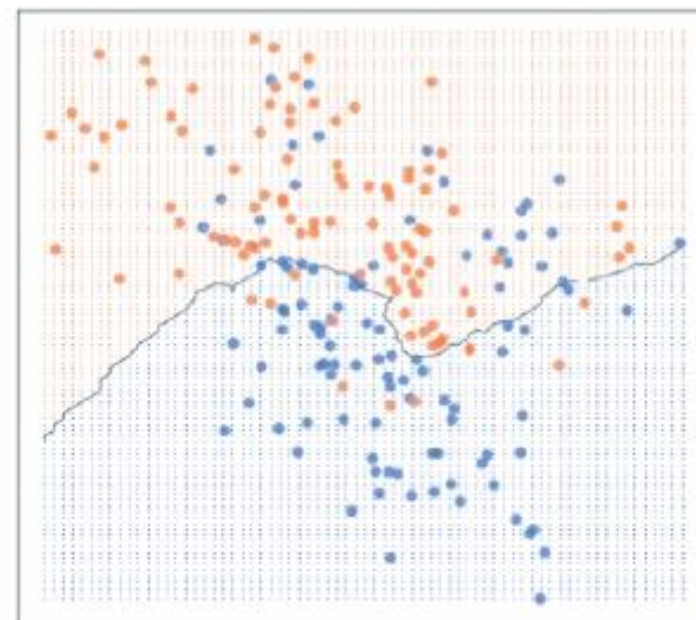
資料科學領域中眾多的演算法固然可以轉化成可供我們建構的潛在模型，不過，即使是單一演算法也可能產生截然不同的結果，而這取決於該演算法的參數如何調整。



a) 過適 (Overfit)



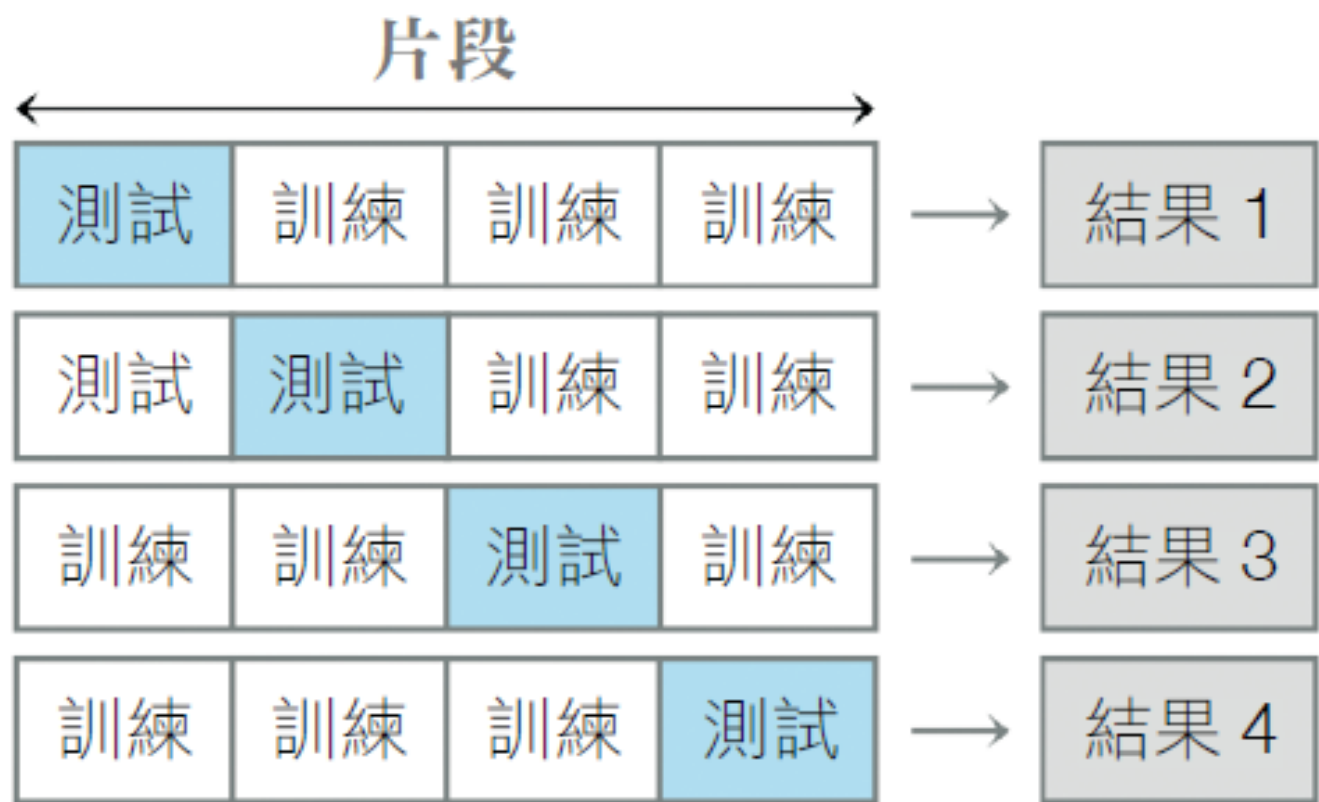
b) 理想配適 (Ideal fit)



c) 乏適 (Underfit)

## ■ 驗證

然而，指標無法完整展現模型的效能。由於模型可能出現「過適」，現有資料的模型可能不適用於分析新的資料。為了避免模型出現「過適」，我們必須使用適當的驗證程序來檢驗模型。



15

# 常用基本模型簡介

# 學習模型

- 基本學習模型
  - 決策樹 - Decision Tree
  - 線性判別分析 - Linear discriminant analysis (LDA)
  - 支持向量機 - Support vector machine (SVM)
  - 最近鄰居法 - k-nearest neighbors algorithm (kNN)
  - 集成學習 - Ensemble



# 基本模型介紹 - 決策樹

## ■ 簡介

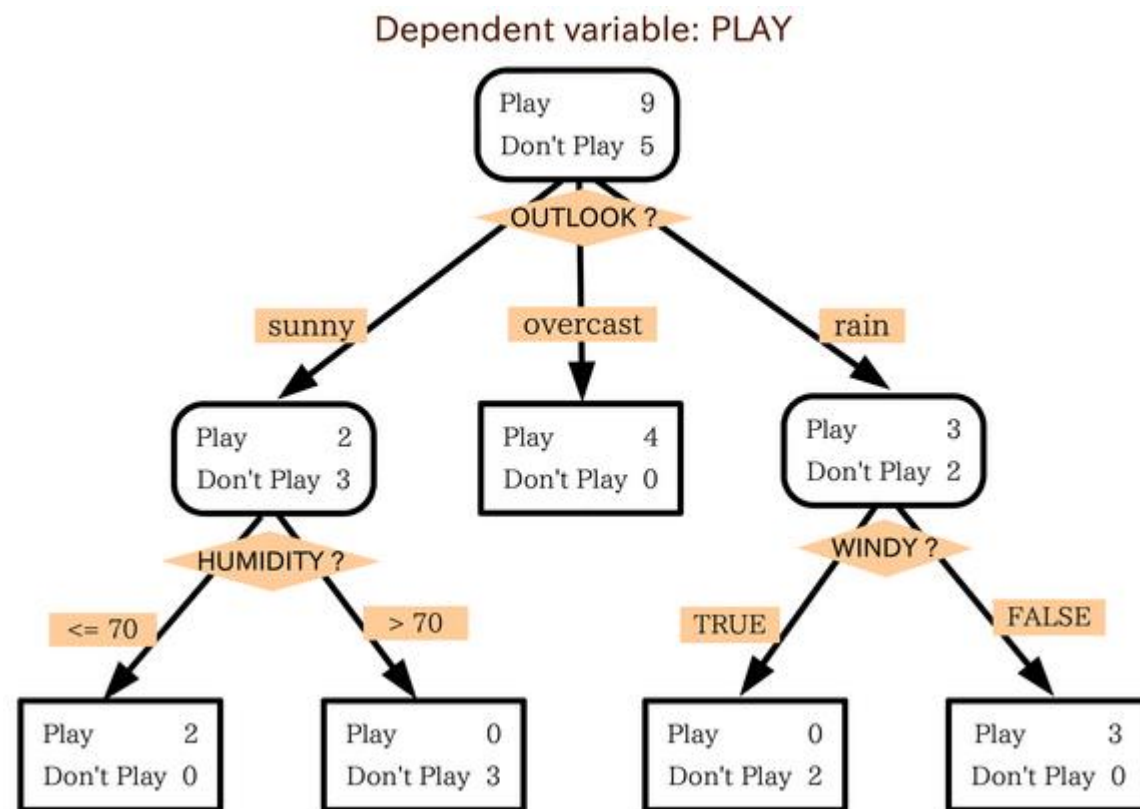
- 監督式機器學習模型
- 適用於分類及迴歸資料類型的預測
- 葉子: 特徵; 樹枝: 屬性

## 優點

- 易於理解和實現
- 是白箱模型
- 執行效率高
- 對雜訊處理有好的強健性

## 缺點

- 若各類別樣本數量不一致, 結果會偏向於具有更多數值的特徵
- 決策樹創建的過度複雜會導致過擬合
- 有些問題決策樹沒辦法很好的解決



# 基本模型介紹 - 線性判別分析

## ■ 簡介 [4] [5]

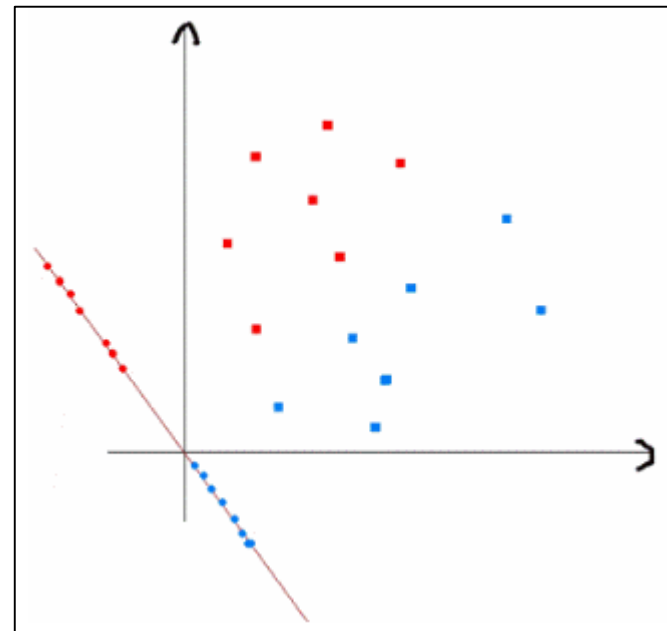
- 監督式機器學習模型
- 有考慮樣本類別輸出的降維技術
- 試圖找到兩類物體的特徵的線性組合，以能夠特徵化或區分他們

## 優點

- 既可以用來降維，又可以用來分類
- 在進行影像識別相關的資料分析時，是一個有力的工具

## 缺點

- 不適合對非高斯分布樣本進行降維



LDA 分類的目標是，使得類別內的點距離越集中越好，類別間的點越遠越好。

# 基本模型介紹 - 支持向量機 (SVM)

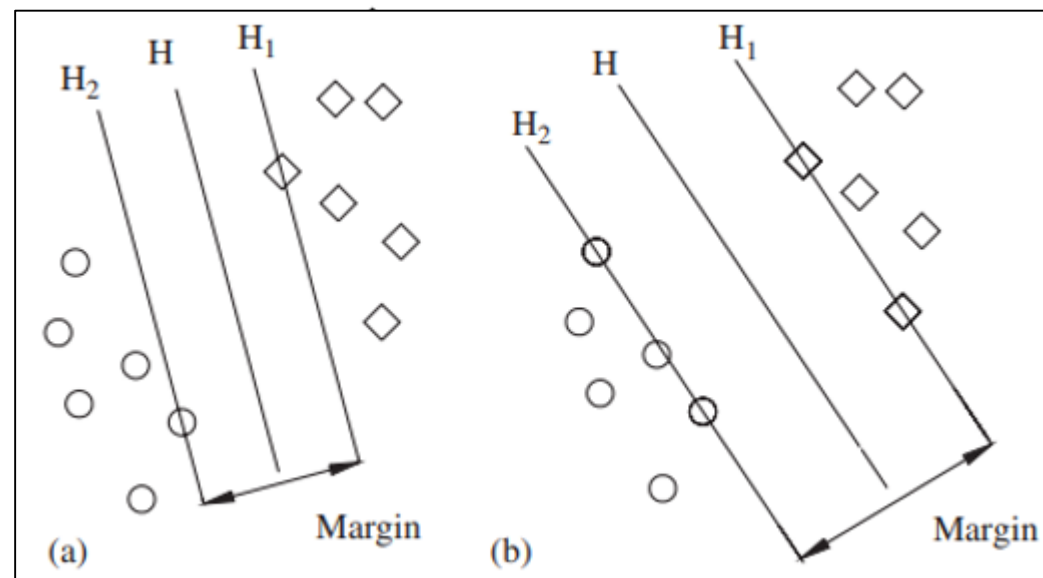
- 簡介
- 監督式機器學習模型
  - 適用於分類及迴歸資料類型的預測

## 優點

- 分類效果好
- 有效地處理高維空間數據
- 有效地處理變量個數大於樣本個數的數據

## 缺點

- 無法處理包含太多雜訊的資料集
- 處理大規模資料需要較長訓練時間



- 支持向量 (Support Vector) 是指在訓練資料集 (Training data set) 中，用於分類上給予最多資訊的點，如圖中紅色框起來的資料點。
- SVM主要是在尋找具有最大margin的 hyperplane 因為其具有較高的分類準確性，如圖中所示藍色箭頭指示的範圍。

# 基本模型介紹 - 最近鄰居法 (KNN)

## ■ 簡介

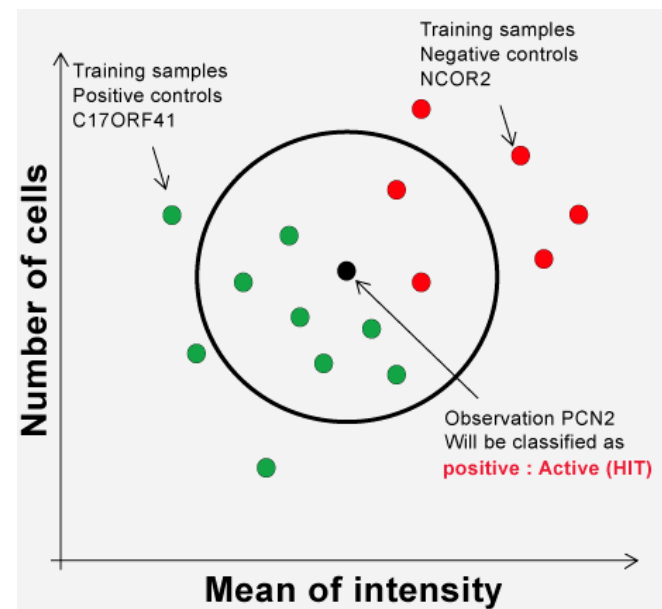
- 監督式機器學習模型
- 一般用來做資料的分類
- $K$  表示一個常數，簡單的來說  $kNN$  就是看離你最近的 $K$ 個點，哪個類別最多則自己也變成那個類別

## 優點

- 易於理解、實現
- 無須估計參數、訓練
- 適合多分類問題 (對象具有多個類別標籤)

## 缺點

- 樣本不平衡時，新進樣本容易被影響
- 計算量相當大
- 需要大量記憶體



這張圖， $k=8$  所以周遭有6綠2紅，那個黑點理所當然就變成綠色的。

# 基本模型介紹 - 集成學習

## 簡介

透過多次執行“基礎學習演算法”，並對每次產生的假說進行投票，最後整合投票的結果構成一致性的假說。

## 優點

- 集成學習器通過將多個學習器進行組合，常可獲得比單一學習器顯著的泛化性能。

## 缺點

- 多個學習器混合在一起的預測結果不可理解，是在黑盒系統。

