

Python 資料科學應用開發

第十四堂:模型評估與效能調校 (Model Evaluation and Performance Tuning)

#### 同學,歡迎你參加本課程

- **☑** 請關閉你的FB、Line等溝通工具,以免影響你上課。
- ✓ 考量頻寬、雜音,請預設關閉攝影機、麥克風,若有需要再打開。
- ☑ 隨時準備好,老師會呼叫你的名字進行互動,鼓勵用麥克風提問。
- ✓ 如果有緊急事情,你必需離開線上教室,請用聊天室私訊給老師, 以免老師癡癡呼喚你的名字。
- ✓ 軟體安裝請在上課前安裝完成,未完成的同學,請盡快進行安裝。

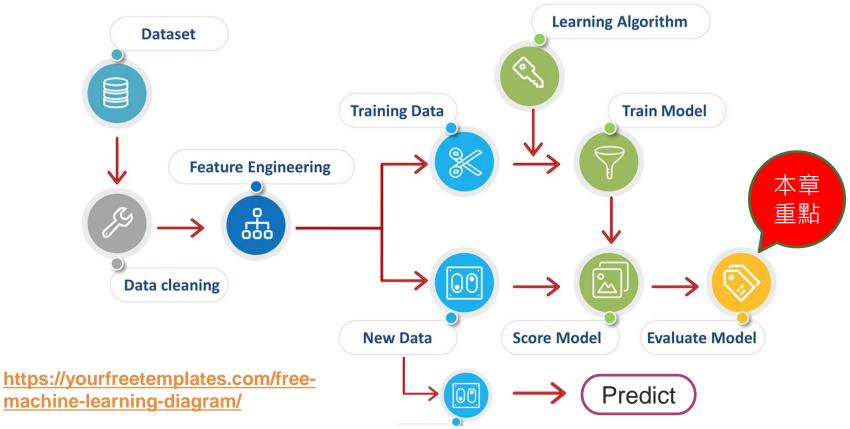
# 課程檔案下載



# ZOOM 學員操作說明



# 機器學習流程



# 課程內容

#### 效能調校方法

- 簡化效能調校流程
- 各種效能調校的方法

#### 效能衡量指標

- 混淆矩陣
- 準確率、精準率、召回率
- ROC · AUC

# 課程內容

#### 效能調校方法

- 簡化效能調校流程
- 各種效能調校的方法

#### 效能衡量指標

- 混淆矩陣
- 準確率、精準率、召回率
- ROC \ AUC

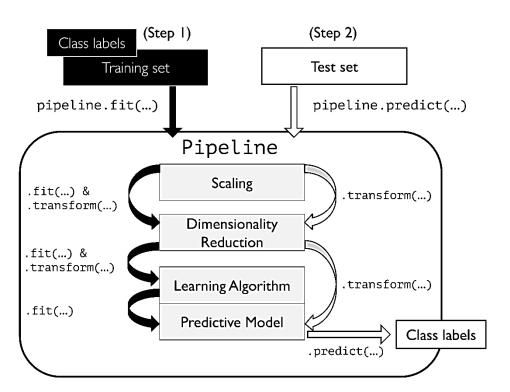
# 簡化效能調校流程

- ◆ 管線(Pipeline):以管線定義工作流程,簡化程式,方便調校『超參數』(Hyperparameter),找出最佳效能
- ◆ 例如:下列指令提供三項工作串成─個管線,依序執行 pipe\_Ir = make\_pipeline(StandardScaler(),

PCA(n\_components=2),

LogisticRegression(random\_state=1))

### 圖解



9

◆ 管道內會進行的事情

Scaling 資料縮放 Dimensionality Reduction

降低維數

Learning Algorithm 學習演算法

Model 預測模型

**Predictive** 

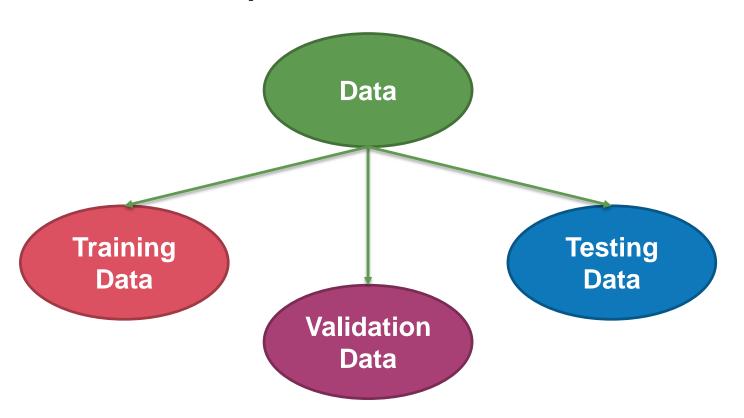
# 實作

- ◆ 程式碼: ch06.ipynb 第 4~9 格
  - ◆ 以 Breast Cancer Wisconsin dataset 為例
- ◆ 請問準確率 =?
- ◆ 若 PCA 的主成分數目提高,準確率是否會隨之提高?

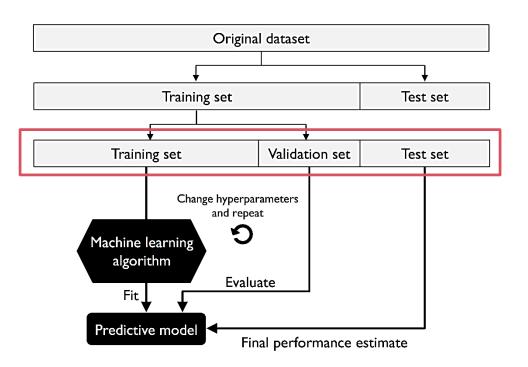
# K 折交叉驗證法(K-fold Cross-Validation)

- ◆ 正規化(Regularization)可以解決過度擬合(Overfitting)的問題。 反之,若模型太過簡單,則會產生低度擬合(Underfitting),偏差過大。
- ◆ 為折衷偏差(Bias)與變異(Variance),可以採用『交叉驗證法』 (Cross Validation),分兩種:
  - ◆ 保留交叉驗證法 (Holdout Cross Validation)
  - ◆ K 折交叉驗證法 ( K fold Cross Validation )

# 保留交叉驗證法(Holdout Cross Validation)



# 用法



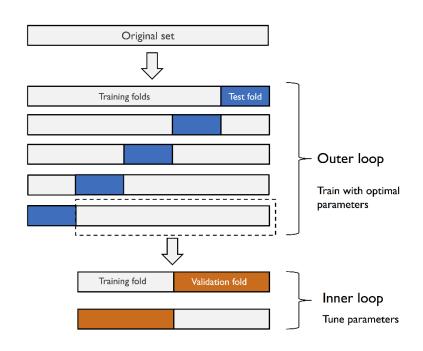
14

# 缺點

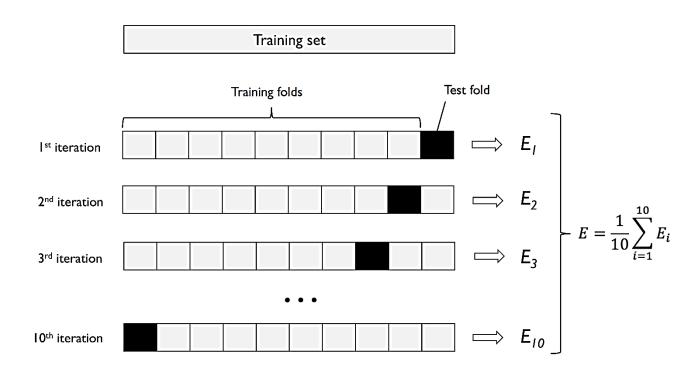
- ◆ 資料切割不當,會造成效能評估不穩定
- ◆ K 折交叉驗證法 ( K fold Cross Validation ) 可修正此一問題

# K 折交叉驗證法(K fold Cross Validation)

- ◆ 隨機將資料切割成 K 份
  - ◈ K-1份當作訓練資料
  - ◆ 1份當作測試資料
- 重複 K 次,放入模型中,會得到K 個模型及效能評估值
- ◆ 效能評估值取平均值,即為最終 模型的效能



# 模型效能



# K 值的選擇

然而,如果我們原始的「訓練數據集」相對來說是很小的時候,那麼增加 會很有用了。如果我們增加k的值,則在每次的迭代中,就可以使用更多的 據」。那麼當我們計算這些模型(對個別折數據)效能評估的平均值,並以此平均值當 作該模型的一般「效能估計」值的時候,這個估計值會有較低的「偏誤」。然而,k 值越 大時,也會同時增加「交叉驗證演算法」的執行時間,並且會產生較大的「變異數 一個相對較 ,我們可以選擇 並且仍然可以獲得該「模型平均效能」的正確估計,同時減少對每折中, 與「模型評估」的計算成本。

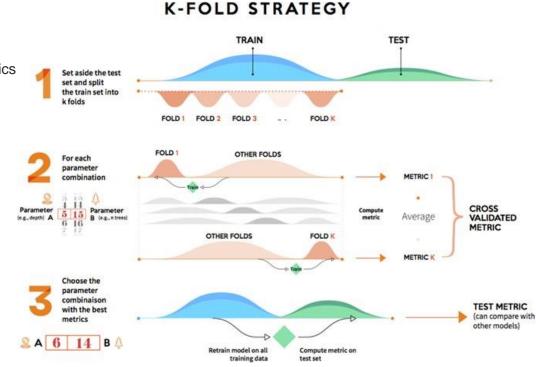
### 實作

- ◆ 程式碼:ch06.ipynb 第 13~14 格
  - ◆ scikit-learn 提供 cross\_val\_score 函數,進行 K 折交叉驗證法
- ◆ Lab (275x)
  - Module5-275 / FeatureSelection.ipynb
- ◆ Lab 流程
  - Load the dataset
  - Eliminate low variance features
  - Select k best features
  - Apply nested cross validation to create model
  - Test the model

# K 折交叉驗證法(K fold Cross Validation)

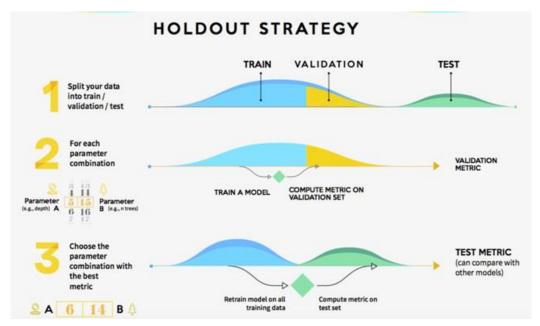
- 1.Set aside the test set and split the train set into k folds
- 2. For each parameter combination
- 3. Choose the parameter combinaison with the best metrics
- 1.保留測試區塊並將資料分成k個折疊
- 2.執行k個區域的資料訓練,進行參數組合
- 3.選擇具有最佳指標的參數組合後進行測試
- 優點: 使用整個訓練資料集而降 低擬合。
- 缺點: 更高的計算成本,模型 需要在驗證步驟中訓練K次(在測 試步驟再加一次)。

學習曲線與驗證曲線的交叉驗證法預設為 K 折交叉驗證法



# 保留交叉驗證法(Holdout Cross Validation)

- 1. Split your data into train/validation /test
- 2. For each parameter combination
- 3. Choose the parameter combination with the best metric
- 1.將您的資料拆解為訓練/驗證/測試
- 2.對於每個參數進行組合。訓練每一個模型, 然後送到驗證資料集進行驗證與計算準確度。
- 3.選擇具有最佳效果的參數組合,計算所有訓練資料內的 各模型的準確度,挑選一個出來進行後續的測試。
  - 優點:完全獨立的資料;只需運行一次, 因此計算成本較低。
  - 缺點:適合較小規模的資料,較大規模 資料可能出現較大差異的評估。



2020/3/6

# 不均衡資料

- ◆ 不均衡的資料預測起來很簡單,以較多的那一面進行即可。
- ◆ 所以機器學習可能到最後就以預測較多的那一部分為主。
- ◆ 調整方式
  - ◈ 獲取更多資料
    - 有時候只是因為前半段時期的資料大都是某一種趨勢,也許到了後半段時間的資料走向就不同。
  - ◆ 更換判斷成果的方式
    - 通常我們會使用準確率 accuracy 或者誤差 cost 來判斷機器學習的成果,可是當這些判斷成果方法在不均 衡資料前,高的準確率與低的誤差變得不重要,建議改用別的方式。
    - 使用混淆矩陣 Confusion Matrix 、精確率 Precision 與召回率 Recall,藉由計算 F1 分數方式區分。

# 不均衡資料

- ◆ 調整方式
  - ◆ 重組資料
    - 最簡單但粗暴的方法
    - 第一個是複製或著合成少數部分的樣本,使樣本數與多數部分差不多。
    - 第二個就是砍掉一些多數部分資料。
  - ◈ 使用其他機器學習方法
    - 如果使用神經網路等方法,無法處理不均衡資料,但如果是決策樹等就不會受到影響。
  - ◈ 修改演算法參數

# 課程內容

#### 效能調校方法

- 簡化效能調校流程
- 各種效能調校的方法

#### 效能衡量指標

- 混淆矩陣
- 準確率、精準率、召回率
- ROC \ AUC

# 績效衡量指標 (Performance Metrics)

		True condition				
	Total population	Condition positive	Condition negative	$\frac{\text{Prevalence}}{\sum \text{Condition positive}}$ = $\frac{\sum \text{Condition positive}}{\sum \text{Total population}}$	Σ True positive	cy (ACC) = + Σ True negative population
Predicted	Predicted condition positive	True positive, Power	False positive, Type I error	Positive predictive value  (PPV), Precision =  Σ True positive  Σ Predicted condition positive	False discovery rate (FDR) =  Σ False positive Σ Predicted condition positive	
condition	Predicted condition negative	False negative, Type II error	True negative	False omission rate (FOR) =  Σ False negative Σ Predicted condition negative	Negative predictive value (NPV) = $\frac{\Sigma}{\Sigma}$ True negative $\frac{\Sigma}{\Sigma}$ Predicted condition negative	
		True positive rate (TPR), Recall, Sensitivity, probability of detection $= \frac{\Sigma \text{ True positive}}{\Sigma \text{ Condition positive}}$	False positive rate (FPR), Fall-out, probability of false alarm $= \frac{\Sigma \text{ False positive}}{\Sigma \text{ Condition negative}}$	Positive likelihood ratio (LR+) = TPR FPR	Diagnostic odds ratio $(DOR) = \frac{LR+}{LR-}$	F <sub>1</sub> score = 2 1 1 1 1 1
		False negative rate (FNR), Miss rate $= \frac{\Sigma \text{ False negative}}{\Sigma \text{ Condition positive}}$	True negative rate (TNR), Specificity (SPC) = $\frac{\Sigma \text{ True negative}}{\Sigma \text{ Condition negative}}$	Negative likelihood ratio (LR-) = FNR TNR	(BOIN) = LR=	Recall Precision

https://en.wikipedia.org/wiki/Precision\_and\_recall

# 績效衡量指標 (Performance Metrics)

- ◆ 混淆矩陣
- ◆ 準確率 ( Precision )
- ◆ 覆蓋率 (Recall,也叫作召回率)
- ◆ 皮氏 F-分數 ( Piotroski F-Score ; FSC )
- ◆ ROC 曲線、AUC 曲線

### 常用績效衡量指標

- ◆ 準確率(Accuracy)
- ◆ 精確率 ( Precision )
- ◆ 召回率 (Recall)
- ◆ F1 score = harmonic mean (調和平均數) of precision and sensitivity = 2 / ((1/ Precision) + (1/ Recall)),兼顧精確率與召回率
- ◆ 為什麼要有其他比率? (unbalanced samples)
  - ◆ 100個樣本,其中95個是真, 5個是假
    - 全部猜真,準確率:95%
  - → 事實:【假】的準確率=0%
    - ◈ 美國一年有800萬個航空旅客,經統計2000~2017有19個恐怖份子搭機
      - 沒抓到半個 → 準確率=99.9999999%

Sample classification\_report.py

# 實作

- ◆ 程式碼:classification\_report.ipynb
  - ◆ scikit-learn 提供 classification\_report 函數

# 混淆矩陣(Confusion Matrix)

		真實狀況	
		事實為真	事實為假
預測狀況	預測為真	tp	fp (Type I error)
	預測為假	fn (Type II error)	tn

#### ◆ 以預測的角度看

- ◆ tp:預測為真,預測正確
- ◆ tn:預測為假,預測正確
- ◆ fp:預測為真,預測錯誤
- ♦ fn:預測為假,預測錯誤

- 準確率(Accuracy)= (tp+tn)/(tp+fp+fn+tn)
- 精確率 (Precision) = tp/(tp+fp) 判斷致癌的病人正確的比率,有幾個被誤診?
- 召回率(Recall)= tp/(tp+fn) 所有恐怖分子被識別的比率,有幾個沒被找到?

### 各種績效衡量指標

Confusion matrix -Wiki

	True condition					
	Total population	Condition positive	Condition negative	$= \frac{\Sigma \text{ Condition positive}}{\Sigma \text{ Total population}}$	Σ True positive	cy (ACC) = + Σ True negative population
Predicted	Predicted condition positive	True positive, Power	False positive, Type I error	Positive predictive value  (PPV), Precision =  Σ True positive Σ Predicted condition positive	False discovery rate (FDR) =  Σ False positive Σ Predicted condition positive	
condition	Predicted condition negative	False negative, Type II error	True negative	False omission rate (FOR) = $\frac{\Sigma}{\Sigma}$ False negative $\frac{\Sigma}{\Sigma}$ Predicted condition negative	Negative predictive value (NPV) : Σ True negative Σ Predicted condition negative	
		True positive rate (TPR), Recall, Sensitivity, probability of detection = Σ True positive Σ Condition positive	False positive rate (FPR), Fall-out, probability of false alarm = $\frac{\Sigma \text{ False positive}}{\Sigma \text{ Condition negative}}$	Positive likelihood ratio (LR+) = TPR FPR	Diagnostic odds ratio (DOR) = LR+ IR-	$F_1 \text{ score} = \frac{2}{1 + \frac{1}{\text{Recall}} + \frac{1}{\text{Precision}}}$
		False negative rate (FNR), Miss rate $= \frac{\Sigma \text{ False negative}}{\Sigma \text{ Condition positive}}$	True negative rate (TNR), Specificity (SPC) = $\frac{\Sigma \text{ True negative}}{\Sigma \text{ Condition negative}}$	Negative likelihood ratio (LR-) = FNR TNR	(BON) ER-	Recall TPrecision

sensitivity, recall, hit rate, or true positive rate (TPR)

$$ext{TPR} = rac{ ext{TP}}{P} = rac{ ext{TP}}{ ext{TP} + ext{FN}}$$

precision or positive predictive value (PPV)

$$PPV = \frac{TP}{TP + FP}$$

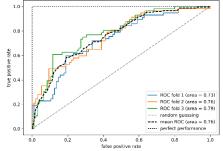
$$F1 = 2\frac{PRE \times REC}{PRE + REC}$$

# 實作

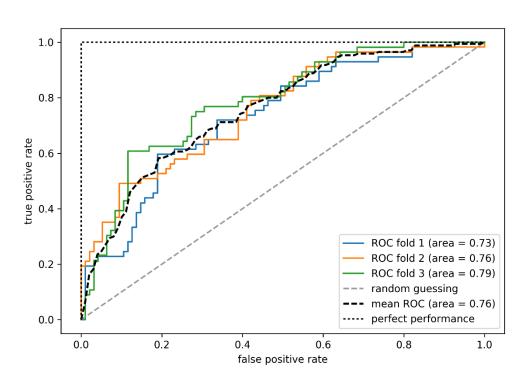
- ◆ 程式碼:confusion matrix.ipynb
  - ◈ 請計算
    - 準確率(Accuracy)
    - 精確率 ( Precision )
    - 召回率 (Recall)
    - F1 score
  - ◆ 並畫出 confusion matrix

### ROC/AUC

- ◆ 接收操作特徵圖(Receiver operator characteristic; ROC): 在各種決策門檻(decision threshold)下,比較『真陽率』(True Positive Rate; TPR)與『假陽率』(False Positive Rate; FPR)間的變化
- ◆ 對角線為隨機猜測的效能 低於對角線表示模型效能比隨機猜測還差



### ROC / AUC 圖解



# 實作

- ◆ 程式碼: ch06.ipynb 第 32 格
  - ◆ 使用 K Fold 驗證資料集各種子集合的效能表現

### 實作

- Lab (275x)
  - Module4-275 / Classification.ipynb
  - Module5-275 / CrossValidation.ipynb
  - Module6-275 / SupportVectorMachines.ipynb
  - Module6-275 / NeuralNetworks.ipynb

# 其他效能指標

- precision-recall curves
  - ◆ 請參見 『sklearn.metrics.precision\_recall\_curve』

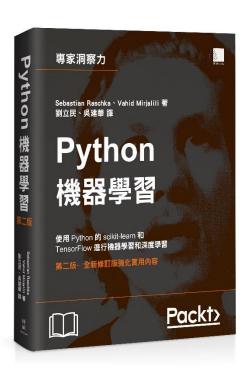
### 作品:鐵達尼資料集實作

- 資料集:鐵達尼(Titanic)
- import seaborn as sns
- titanic = sns.load\_dataset("titanic")
- 以 K 折交叉驗證法實作,比較採用 前後之模型準確率比較





# 參考用書



◆ 書名: Python機器學習(第二版)
http://www.drmaster.com.tw/bookinfo.asp?BookID=MP11804

◆ 作者: Sebastian Raschka, Vahid Mirjalili ISBN

◆ 譯者:劉立民、吳建華

◆ 出版社:博碩

38

# 問卷

#### http://www.pcschoolonline.com.tw



自107年1月1日起,課程錄影檔由180天改為365天(含)內無限次觀看 (上課隔日18:00起)。

上課日期	課程名稱	課程節次	教材下載
2017/12/27 2000 ~ 2200	線上真人-ZBrush 3D動畫造型設計	18	上課教材 錄影 3 課堂問卷
2017/12/20 2000 ~ 2200	線上真人-ZBrush 3D動畫造型設計	17	上課教材 錄影檔
2017/12/18 2000 ~ 2200	線上真人-ZBrush 3D動畫造型設計	16	上課教材

39

問

# **⑤**巨匠線上真人

www.pcschoolonline.com.tw