

Machine Learning

9장 모형 진단과 초모수의 결정

고려대학교 통계학과
박유성



Contents

- 01 Introduction
- 02 K-fold Cross-validation
- 03 Nested Cross-validation
- 04 Classifier의 성능 측정

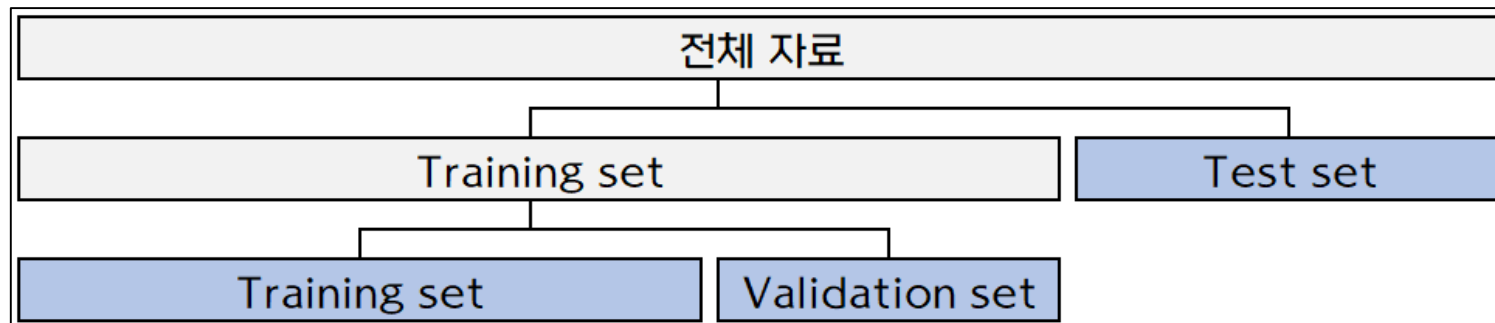
01 Introduction

- Machine Learning의 모형 진단 구분

- Overfitting (low bias & high variance) vs. Underfitting (high bias & low variance)
- 초모수 (hyper parameter) 결정
- 모형간 성능 비교

- 모형 진단을 위한 자료 분할

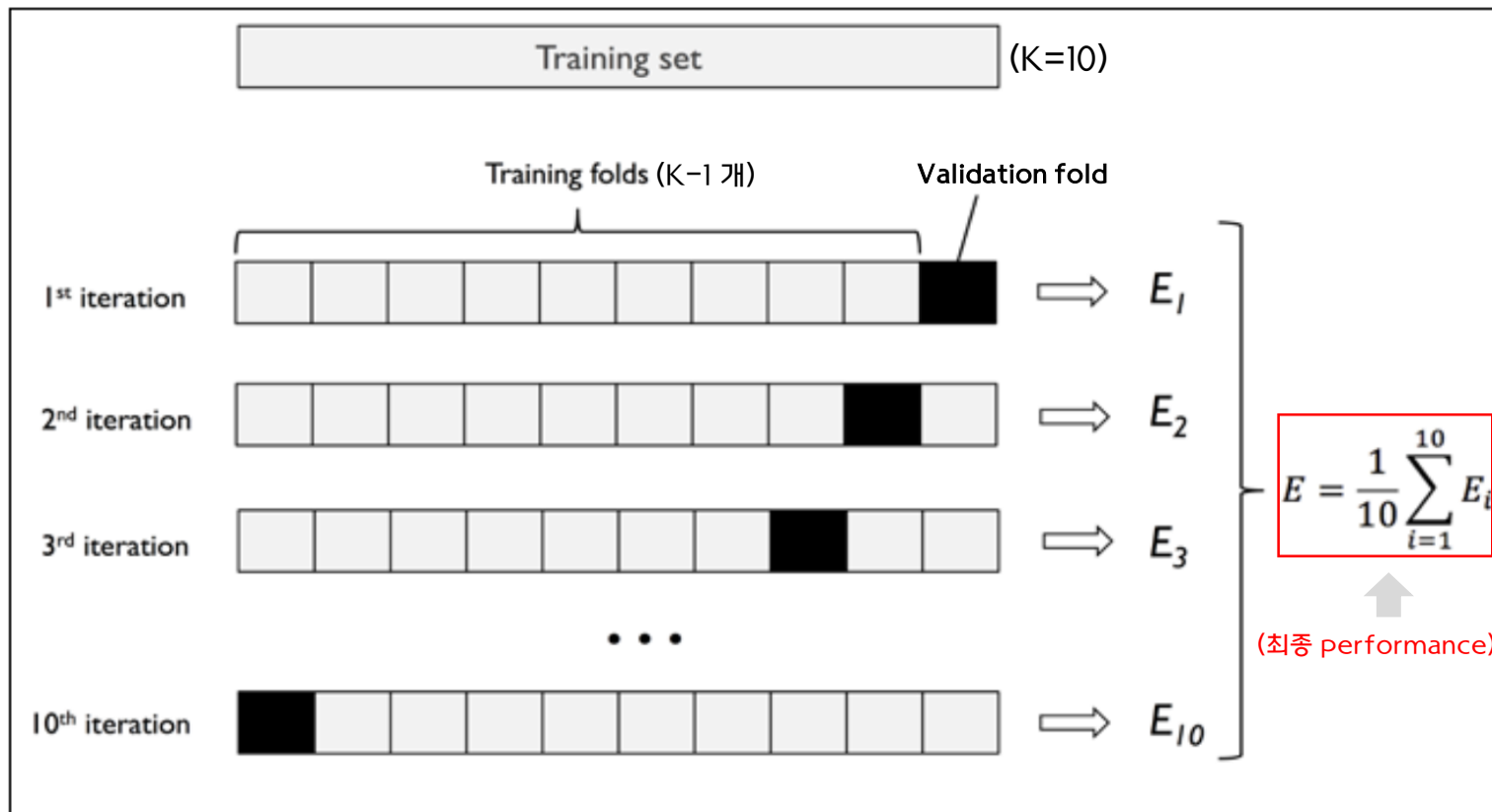
- 전체 자료 → Training set + Validation set + Test set



- ▶ Training set을 이용하여 모형에 포함된 모수 추정
- ▶ Validation set을 이용하여 초모수 (예: 규제화를 위한 λ , SVM의 C) 결정
- ▶ Test set을 이용하여 최종 모형 평가

02 K-fold Cross-validation

- Training set \rightarrow $(K - 1)$ 개의 Training folds + 1개의 Validation fold



- Test set은 고정
- (기호) E_i : i 번째 자료 분할 (iteration)의 validation fold로 부터 구한 performance
- 가장 우수한 $\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K E_i$ 를 보이는 초모수 선택 후, 전체 training set을 이용하여 모델을 재추정

Overfitting vs. Underfitting

High Variance 및 High Bias 진단

- 그림 (a): High bias

▶ Underfitting

▶ 해결:

- ① 특성변수 사용
- ② 규제화 강도 약화

- 그림 (b): High variance

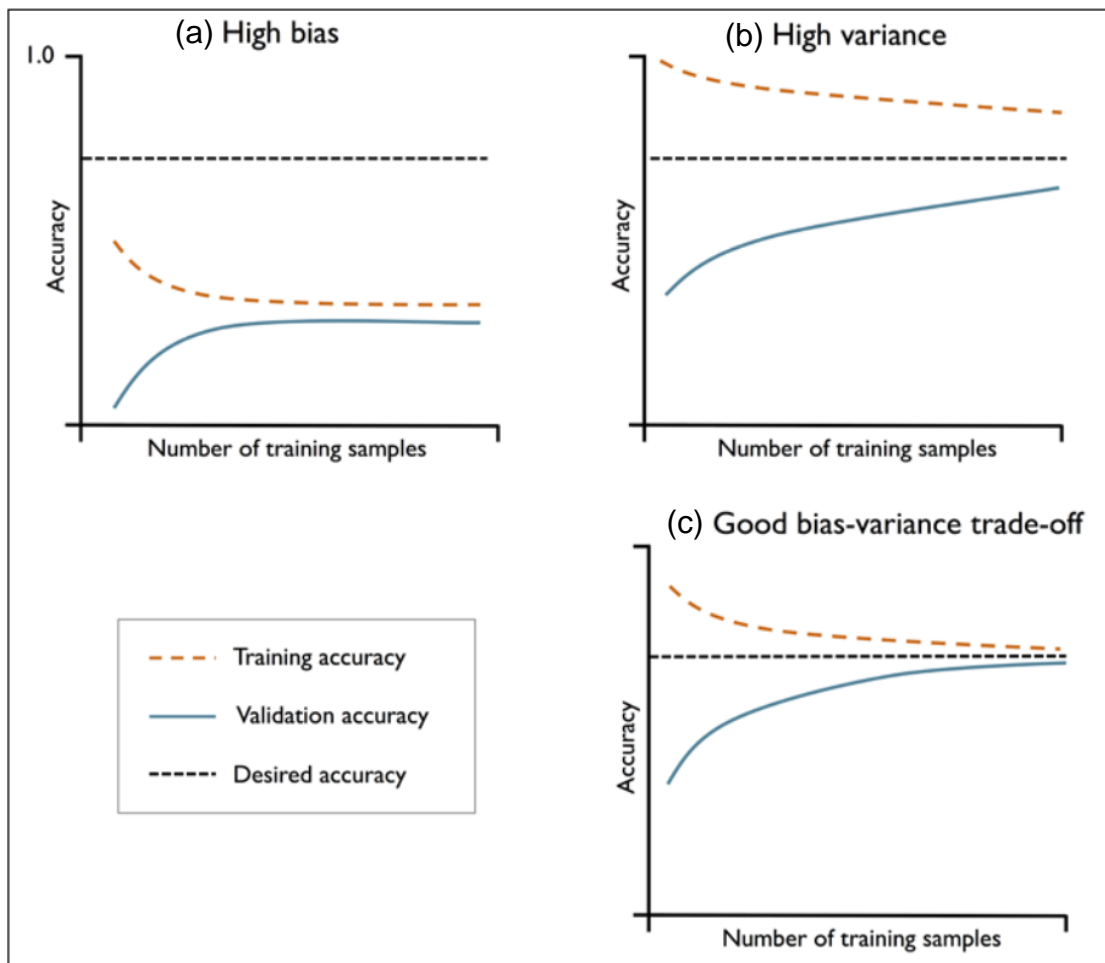
▶ Overfitting

▶ 해결:

- ① 특성변수의 개수 축소
- ② 규제화 강도 강화
- ③ 전체 관측자료 증가

- 그림 (c): 바람직한 결과

▶ 이렇게 되도록 특성변수의 차원과 자료의 크기를 결정



03 Nested Cross-validation

▪ Why?

- 고정된 자료 분할 방식의 문제점: Learning 모형의 performance가 자료 분할에 크게 의존

▪ How?

- Idea: 고정된 Test set → 임의의 Test fold (K_1 개)

- For each test fold i ($i = 1 - K_1$),

▶ Apply K_2 -fold cross-validation

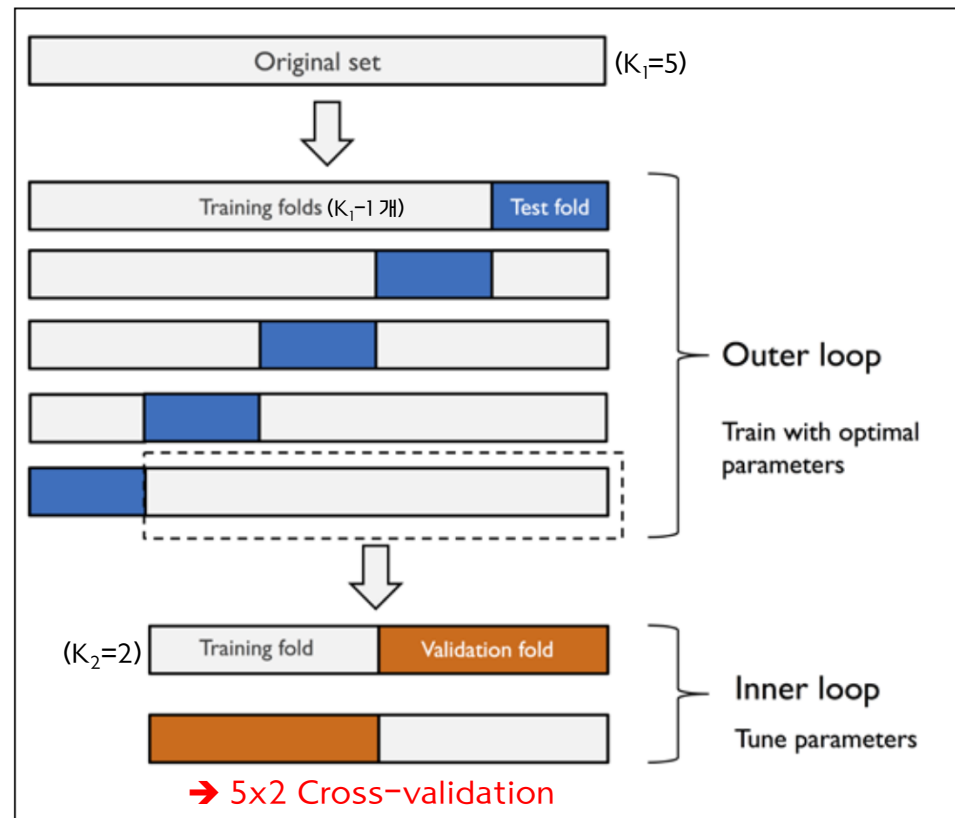
▶ 가장 우수한 $E_i = \frac{1}{K_2} \sum_{j=1}^{K_2} E_{i,j}$ 를 주는
초모수 선택

→ “ K_1 - K_2 Cross-validation”

- 모형의 최종 performance:

$$\text{▶ } E = \frac{1}{K_1} \sum_{i=1}^{K_1} E_i$$

- Learning 모형을 선택하는 기준



04 Classifier의 성능 측정

▪ Confusion Matrix (이항 분류의 경우)

- 분류 (classification) 결과를 count하여 정리한 표

- Class

▶ P: Positive class ($y = 1$), N: Negative class ($y = 0$)

- 분류 결과의 유형

▶ TP (True Positive): P를 P로 맞게 예측

▶ FP (False Positive): N을 P로 잘 못 예측

▶ FN (False Positive): P를 N으로 잘 못 예측

▶ TN (True Positive): N을 N으로 맞게 예측

		Predicted Class	
		P	N
Actual Class	P	True Positive (TP)	False Negative (FN)
	N	False Positive (FP)	True Negative (TN)

▪ 성능의 측도 (Performance measure)

- $Accuracy = \frac{TP+TN}{TP+FP+FN+TN}$ → 그룹 불균형이 심한 경우 성능을 왜곡. (예) 100명의 환자 중 암환자 5명

- $PRE = \frac{TP}{TP+FP}$ (positive class 예측에 대한 정확도)

- $REC = \frac{TP}{TP+FN}$ (positive를 positive로 예측하는 비율)

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

Q & A