범주형자료분석팀

3팀

이정민
이경미
이현진
윤예빈
김준영

CONTENTS

1

혼동행렬

혼동행렬

혼동행렬 *(Confusion Matrix)*

분류 모델의 성능을 평가하기 위한 지표

예측값($\hat{Y}$)과 **실제값(Y)**을 비교

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

T (True) / F (False): 실제값과 예측값의 일치 여부

P (Positive) / N (Negative): 모델의 긍정 혹은 부정 예측 여부

1 혼동행렬

혼동행렬의 네 가지 상황

① TP *(True Positive)*

긍정($\hat{Y} = 1$)으로 예측하였으며 **실제 관측값도 긍정($Y = 1$)**인 경우

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

혼동행렬의 네 가지 상황

② TN *(True Negative)*

부정($\hat{Y} = 0$)으로 예측하였으며 **실제 관측값도 부정($Y = 0$)**인 경우

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

혼동행렬의 네 가지 상황

③ FP *(False Positive)*

긍정($\hat{Y} = 1$)으로 예측하였으나 **실제 관측값은 부정($Y = 0$)**인 경우

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

1종 오류

혼동행렬의 네 가지 상황

④ FN *(False Negative)*

부정($\hat{Y} = 0$)으로 예측하였으나 **실제 관측값은 긍정**($Y = 1$)인 경우

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

2종 오류

혼동행렬의 한계

☝ 정보의 손실이 일어날 수 있음

✌ 임의적인 Cut-off Point를 설정

혼동행렬의 한계

정보의 손실이 일어날 수 있음

이항변수에 맞게
모델의 예측값($\hat{\pi}$) 범주화

→

연속인 예측값($\hat{\pi}$)을 이항의 값($\hat{Y}$)으로
변환시키는 과정에서
숫자가 갖는 정보를 잃게 됨

혼동행렬의 한계

임의적인 Cut-off Point를 설정

ROC 곡선을 이용해 한계를 보완!

분석자가 임의로
Cut-off Point 설정

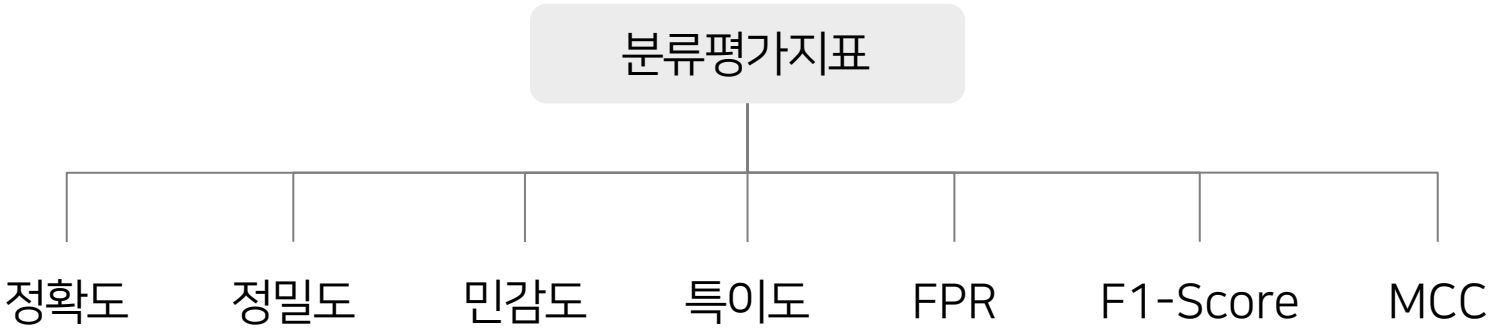
→

분석의 **객관성**을 떨어뜨림

분류평가지표

분류평가지표

혼동행렬을 활용하여 **분류모델의 성능을 평가**하는 지표



각 지표의 **특징과 한계**를 파악하여

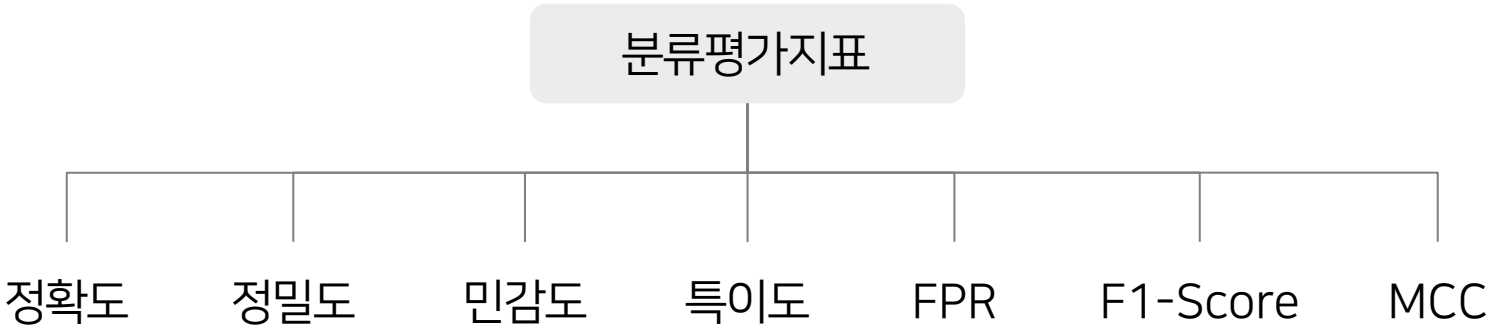
분류평가의 **목적에 맞는 적절한 지표**를 선택해야 함

1 혼동행렬

분류평가지표

분류평가지표

혼동행렬을 활용하여 **분류모델의 성능을 평가**하는 지표



각 지표의 **특징과 한계**를 파악하여

분류평가의 **목적에 맞는 적절한 지표**를 선택해야 함

분류평가지표

① 정확도 *(Accuracy)*

전체 경우에서 **예측값과 실제값이 일치**하는 비율

$$Accuracy = \frac{TP + FN}{TP + FP + FN + TN}$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

1 혼동행렬

분류평가지표

① 정확도 *(Accuracy)*

전체 경우에서 **예측값과 실제값이 일치**하는 비율

$$Accuracy = \frac{TP + FN}{TP + FP + FN + TN}$$

1에 가까울수록 좋은 성능

불균형 데이터에서는 관측치가 많은 수준(class)에 의존하여

정확한 성능 파악 불가

분류평가지표

② 정밀도 *(Precision)*

긍정($\hat{Y} = 1$)으로 예측한 값들 중 **실제 관측값도 긍정**($Y = 1$)인 비율

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

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

1 혼동행렬

분류평가지표

ROC 곡선의 Y축

② 정밀도 *(Precision)*

긍정($\hat{Y} = 1$)으로 예측한 값들 중 **실제 관측값도 긍정**($Y = 1$)인 비율

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

- 1에 가까울수록 좋은 성능
- FP가 **치명적**일 때 주로 사용

유죄($Y = 1$)를 무죄로 선고($\hat{Y} = 0$)하는 것보다 무죄($Y = 0$)를 유죄로 선고($\hat{Y} = 1$)하는 것이 더 위험함

분류평가지표

③ 민감도 *(Sensitivity)* / 재현율 *(Recall)*

실제 긍정$(Y = 1)$인 관측값 중 **긍정**$(\hat{Y} = 1)$**으로 예측**한 비율

$$Sensitivity\ (Recall) = \frac{TP}{TP + FN}$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

1 혼동행렬

분류평가지표

③ 민감도 *(Sensitivity)* / 재현율 *(Recall)*

실제 긍정$(Y = 1)$인 관측값 중 **긍정**$(\hat{Y} = 1)$**으로 예측**한 비율

$$Sensitivity\ (Recall) = \frac{TP}{TP + FN}$$

- 1에 가까울수록 좋은 성능
- FN이 **치명적**일 때 주로 사용

암세포가 없는 사람$(Y = 0)$에게 암이라고 진단$(\hat{Y} = 1)$하는 것보다

암세포가 있는 사람$(Y = 1)$에게 건강하다$(\hat{Y} = 0)$고 진단하는 것이 더 위험

분류평가지표

④ 특이도 *(Specificity)*

실제 부정$(Y = 0)$인 관측값 중 **부정**$(\hat{Y} = 0)$**으로 예측**한 비율

$$Specificity = \frac{TN}{TN + FP}$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

분류평가지표

⑤ FPR *(False Positive Rate)*

실제 부정($Y = 0$)인 관측값 중 **긍정**($\hat{Y} = 1$)**으로 잘못 예측**한 비율

$$FPR = \frac{FP}{TN + FP} = 1 - Specificity$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	TP	FP
	$\hat{Y} = 0$	FN	TN

분류평가지표

ROC 곡선의 X축

⑤ FPR *(False Positive Rate)*

실제 부정($Y = 0$)인 관측값 중 **긍정**($\hat{Y} = 1$)**으로 잘못 예측**한 비율

$$FPR = \frac{FP}{TN + FP} = 1 - Specificity$$

0에 가까울수록 좋은 성능

분류평가지표

⑥ F1-Score

정밀도와 재현율의 조화평균

$$F1\ Score = \frac{2}{\frac{1}{Precision} + \frac{1}{Recall}} = 2 \times \frac{Precision \times Recall}{Precision + Recall}$$

$$= \frac{2TP}{2TP + FN + FP}$$

1에 가까울수록 좋은 성능

분류평가지표

조화평균을 사용하는 이유

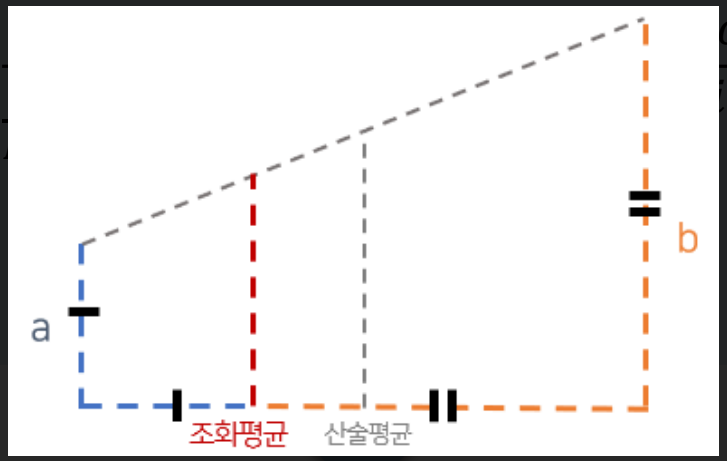
⑥ F1-Score

불균형 데이터에서 정확도의 한계 보완

정밀도와 재현율의 조화평균

상충관계에 있는 정밀도와 재현율을 모두 **균형 있게 반영**

$$F1\ Score = \frac{2 \times Precision \times Recall}{Precision + Recall}$$



더 큰 값에 패널티를 주어 작은 값에 가까운 평균 도출

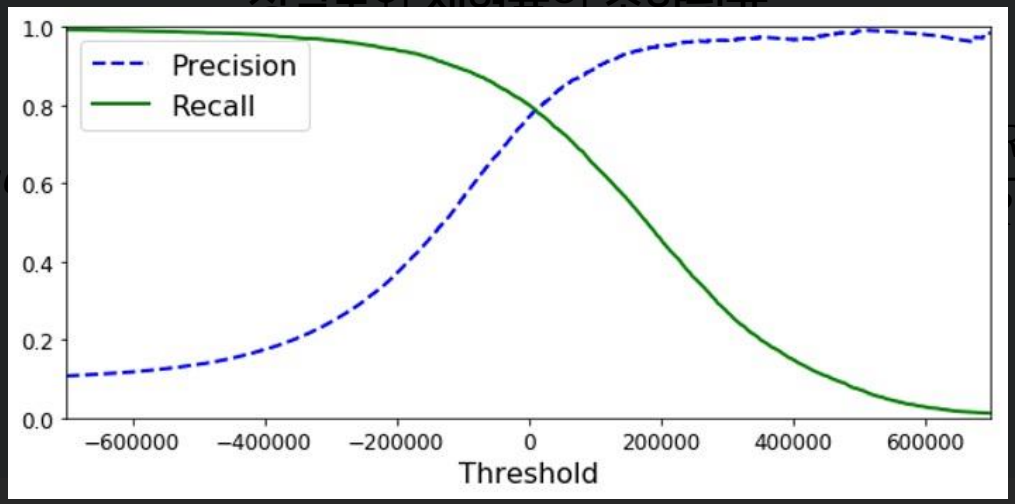
1 혼동행렬

분류평가지표

정밀도와 재현율의 상충관계 *(Trade-off)*

⑥ F1-Score

정밀도와 재현율은 **동시에 큰 값을 가질 수 없음**



정밀도가 높아지면 재현율이 낮아짐

재현율이 높아지면 정밀도가 낮아짐

1 혼동행렬

분류평가지표

F1-Score는 **TN (True Negative) 수치를 반영하지 않는다**는 한계를 가짐

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	26	27
	$\hat{Y} = 0$	24	22

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	26	27
	$\hat{Y} = 0$	24	101

$$F1\ score = \frac{2*26}{2*26+27+24} = 0.505$$로 **같은 값**을 가짐

분류평가지표

F1-Score는 **TN (True Negative) 수치를 반영하지 않는다**는 한계를 가짐

		실제값 (Y)	
		Y = 1	Y = 0
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}$ = 1	26	27
	$\hat{Y}$ = 0	24	22

MCC 지표를 이용해 보완 가능!

		실제값 (Y)	
		Y = 1	Y = 0
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}$ = 1	26	27
	$\hat{Y}$ = 0	24	101

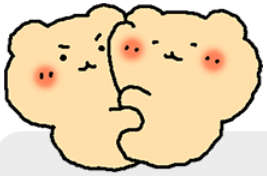
$F1\ score = \frac{2*26}{2*26+27+24} = 0.505$로 같은 값을 가짐

분류평가지표

⑦ MCC *(Matthews Correlation Coefficient)*

혼동행렬의 **모든 구성요소를 활용**하여 계산

$$MCC = \frac{(TP \times TN) - (FP \times FN)}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$



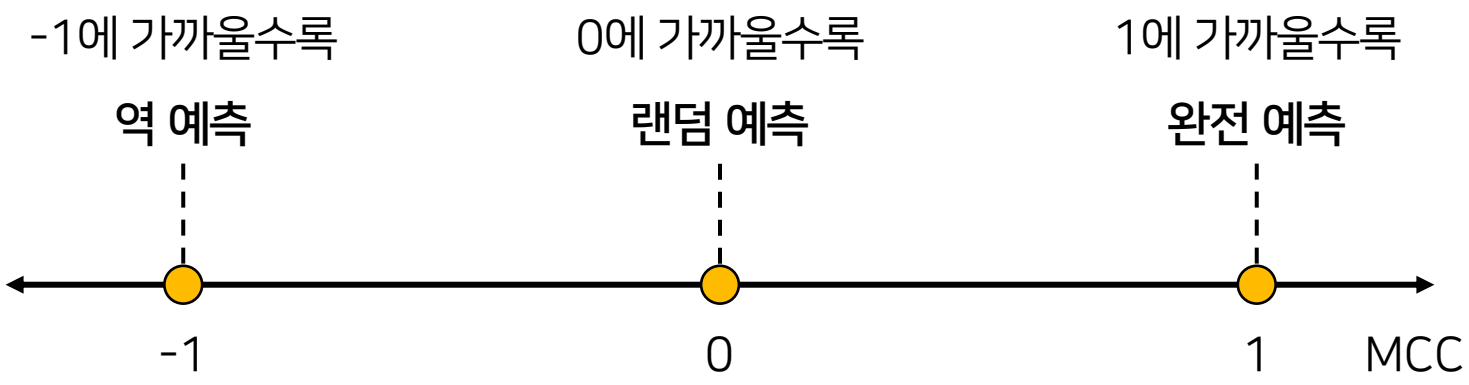
상관계수 값이기 때문에 -1과 1 사이의 값을 가짐

분류평가지표

⑦ MCC *(Matthews Correlation Coefficient)*

혼동행렬의 **모든 구성요소를 활용**하여 계산

$$MCC = \frac{(TP \times TN) - (FP \times FN)}{\sqrt{(TP + FP)(TP + FN)(TN + FP)(TN + FN)}}$$



분류평가지표

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	92	4
	$\hat{Y} = 0$	3	1

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	1	3
	$\hat{Y} = 0$	4	92

TP 관측치가 매우 큰

불균형 데이터

$$F1\ Score = \frac{2 \times 92}{2 \times 92 + 4 + 3} = 0.96$$

$$MCC = \frac{(92 \times 1) - (4 \times 3)}{\sqrt{(92 + 4)(92 + 3)(1 + 4)(1 + 3)}} = 0.18$$

분류평가지표

		실제값 (Y)	
		Y = 1	Y = 0
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	92	4
	$\hat{Y} = 0$	3	1

		실제값 (Y)	
		Y = 1	Y = 0
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y} = 1$	1	3
	$\hat{Y} = 0$	4	92

TN 관측치가 매우 큰

불균형 데이터

$$F1\ Score = \frac{2 \times 1}{2 \times 1 + 3 + 4} = 0.22$$

$$MCC = \frac{(1 \times 92) - (3 \times 4)}{\sqrt{(1+3)(1+4)(92+3)(92+4)}} = 0.18$$

분류평가지표

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	92	4
	$\hat{Y} = 0$	3	1

$$F1\ Score = \frac{2 \times 92}{2 \times 92 + 4 + 3} = 0.96$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	1	3
	$\hat{Y} = 0$	4	92

$$F1\ Score = \frac{2 \times 1}{2 \times 1 + 3 + 4} = 0.22$$

F1-Score는 큰 차이가 나타남

분류평가지표

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	92	4
	$\hat{Y} = 0$	3	1

$$MCC = \frac{(92 \times 1) - (4 \times 3)}{\sqrt{(92+4)(92+3)(1+4)(1+3)}} = 0.18$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	1	3
	$\hat{Y} = 0$	4	92

$$MCC = \frac{(1 \times 92) - (3 \times 4)}{\sqrt{(1+3)(1+4)(92+3)(92+4)}} = 0.18$$

MCC는 0.18로 같음

1 혼동행렬

분류평가지표

F1-Score는 TN 값을 반영하지 않기 때문에

TN 값의 차이가 클수록 F1-Score의 값에 차이가 발생

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	92	4
	$\hat{Y} = 0$	3	1

$$MCC = \frac{(92 \times 1) - (4 \times 3)}{\sqrt{(92+4)(92+3)(1+4)(1+3)}} = 0.18$$

		실제값 (Y)	
		$Y = 1$	$Y = 0$
예측값 $(\hat{Y})$	$\hat{Y} = 1$	1	3
	$\hat{Y} = 0$	4	92

$$MCC = \frac{(1 \times 92) - (3 \times 4)}{\sqrt{(1+3)(1+4)(92+3)(92+4)}} = 0.18$$

F1-Score 한 가지만 이용하여 모델의 성능을 판단하는 것은 매우 위험

MCC는 0.18로 같음

분류평가지표

MCC가 항상 F1-Score보다 좋은 지표일까?

예측값 $(\hat{Y})$ \ 실제값 (Y)	$Y=1$	$Y=0$
$\hat{Y}=1$	92	4
$\hat{Y}=0$	3	1

분석 목적이 모든 클래스에 대한 균형적인 평가인 경우

MCC

$$MCC = \frac{(92 \times 1) - (4 \times 3)}{\sqrt{(92+4)(92+3)(1+4)(1+3)}} = 0.18$$

예측값 $(\hat{Y})$ \ 실제값 (Y)	$Y=1$	$Y=0$
$\hat{Y}=1$	1	3
$\hat{Y}=0$	4	92

희귀질환과 같이 중요하지만 관측치가 적은 경우

이를 Positive로 두고 F1-Score

$$MCC = \frac{(1 \times 92) - (3 \times 4)}{\sqrt{(1+3)(1+4)(92+3)(92+4)}} = 0.18$$

목적에 맞는 분류평가지표를 선택하는 것이 중요!

MCC는 0.18로 같음

2

ROC 곡선

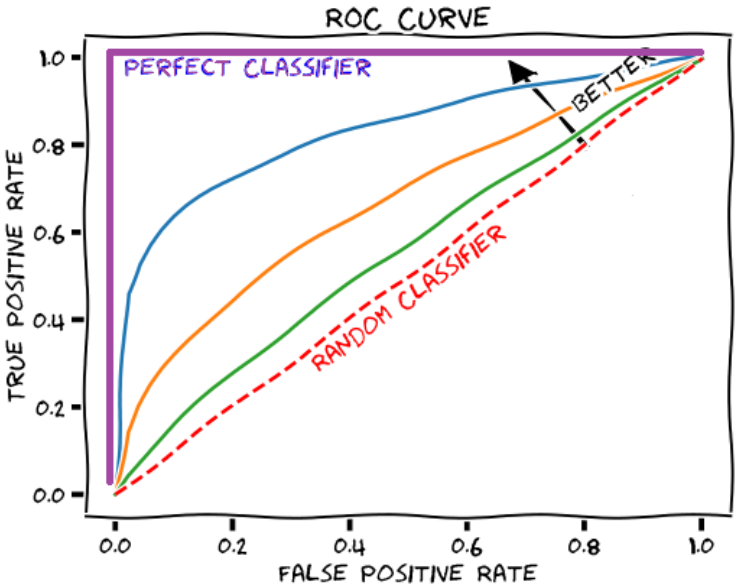
ROC 곡선

ROC 곡선 *(Receiver Operating Characteristic Curve)*

0~1 사이의 가능한 모든 **cut-off point**에 대해

재현율을 **1-특이도**의 함수로 나타낸 곡선 혹은 직선

Y축 FPR, X축



모든 cut-off point에 대한

혼동행렬을 구하고

각 **혼동행렬에 해당**하는 **X, Y값**을

그래프에 점으로 표시해 연결한 것!

2 ROC 곡선

ROC 곡선의 장점

혼동행렬보다 더 많은 정보를 가짐

주어진 모형에서 **가장 적합한** cut-off point를 찾을 수 있음

ROC 곡선

ROC 곡선의 형태

(0,0)과 (1,1)을 잇는 위로 볼록한 우상향하는 형태

(0,0)에서 (1,1)을 잇는 형태인 이유

cut-off point가 0에 가까운 값을 지님 → 대부분 $\hat{Y} = 1$로 예측

→ TP&FP 증가 → TN&FN 감소 → TPR&FPR (1,1)에 가까워짐

(0,0)에 가까워질 때는 그 반대 !

ROC 곡선

ROC 곡선의 형태

(0,0)과 (1,1)을 잇는 위로 볼록한 우상향하는 형태

(0,0)에서 (1,1)을 잇는 형태인 이유

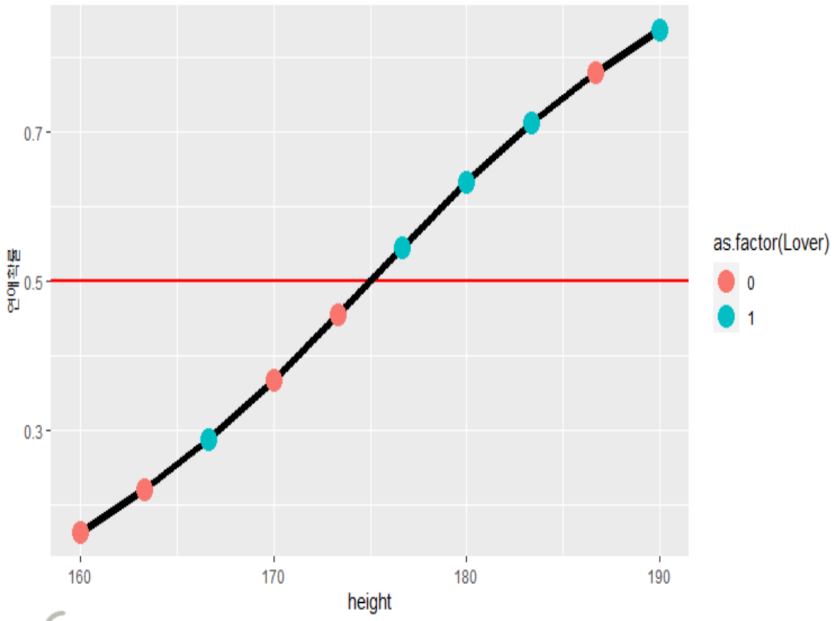
cut-off point가 0에 가까운 값을 지님 ➡ 대부분 $\hat{Y} = 1$로 예측

➡ TP&FP 증가 ➡ TN&FN 감소 ➡ TPR&FPR (1,1)에 가까워짐

(0,0)에 가까워질 때는 그 반대 !

2 ROC 곡선

최적의 Cut-off point 찾기



키에 따른 연애 여부를 나타낸 그래프

파란 원 : 연애 중인 관측치

빨간 원: 연애 중이 아닌 관측치

$$\log\left[\frac{\pi(x)}{1-\pi(x)}\right] = -19 + 0.1x$$

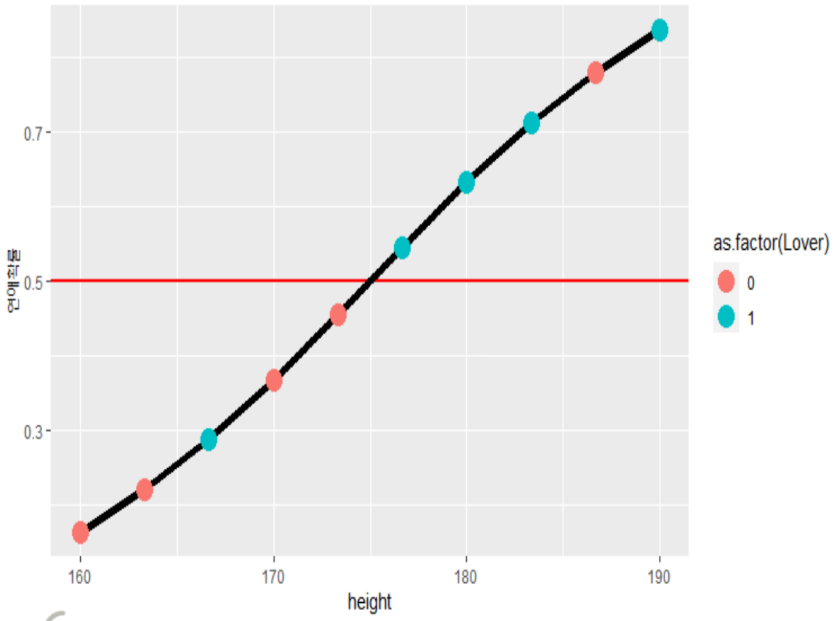
cut-off point가 0.5라면

0.5보다 큰 값은 $\hat{Y} = 1$로 예측

0.5보다 작은 값은 $\hat{Y} = 0$로 예측

2 ROC 곡선

최적의 Cut-off point 찾기



키에 따른 연애 여부를 나타낸 그래프

파란 원 : 연애 중인 관측치

빨간 원: 연애 중이 아닌 관측치

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	4	1
	$\hat{Y}=0$	1	4

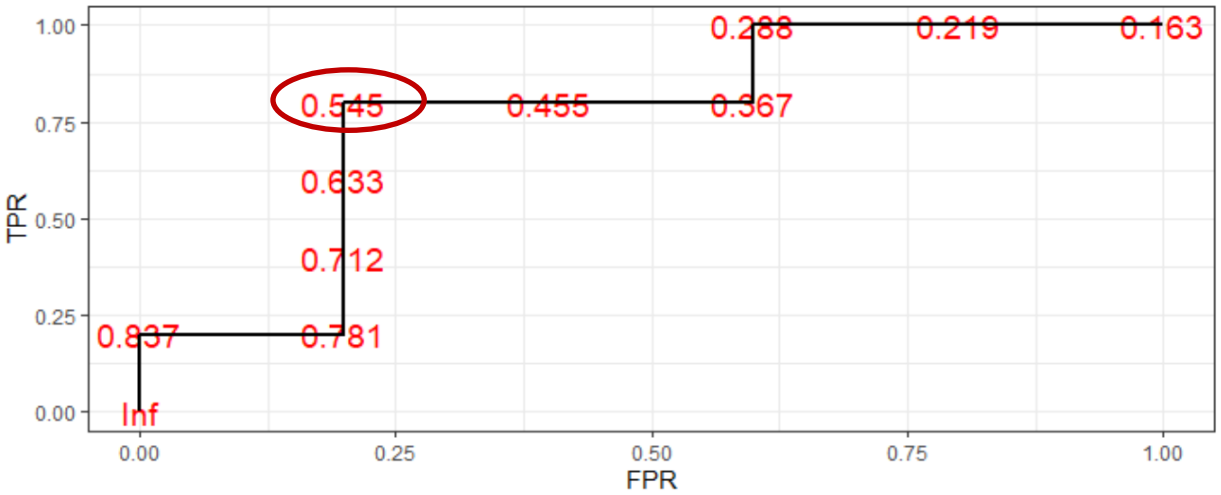
$$\text{TPR} = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{4}{4+1} = 0.8$$

$$\text{FPR} = \frac{FP}{FP+TN} = \frac{1}{1+4} = 0.2$$

2 ROC 곡선

최적의 Cut-off point 찾기

ROC 곡선의 빨간 글씨는 각 cut-off point를 나타냄



Y값(TPR)이 같을 때, X값(FPR)이 더 작을수록 좋은 cut-off point

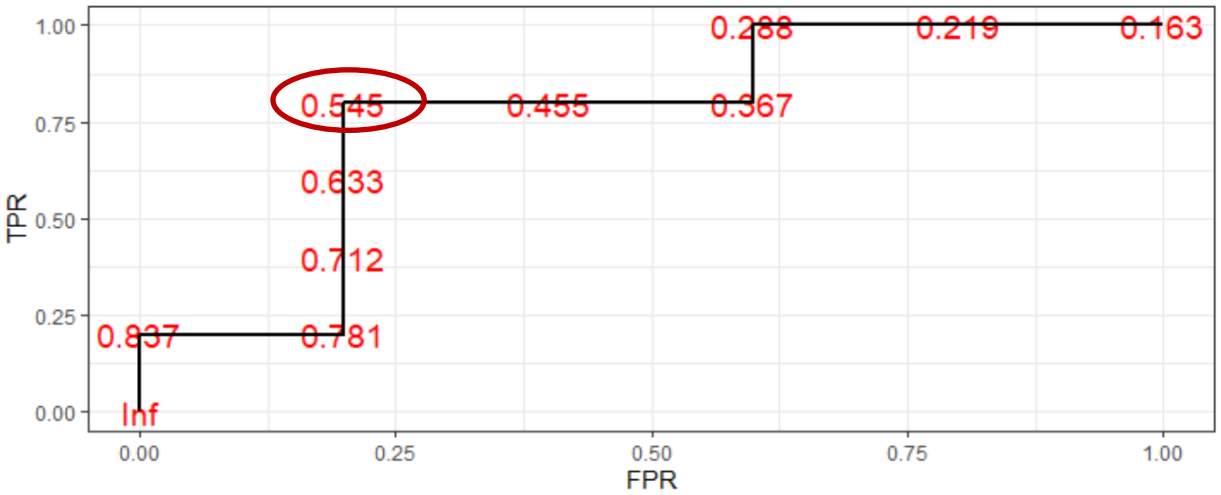
X값(FPR)이 같을 때, Y값(TPR)이 더 클수록 좋은 cut-off point

0.545가 같은 FPR값에 대해 최적의 cut-off point !

2 ROC 곡선

최적의 Cut-off point 찾기

ROC 곡선의 빨간 글씨는 각 cut-off point를 나타냄



Y값(TPR)이 같을 때, X값(FPR)이 더 작을수록 좋은 cut-off point

X값(FPR)이 같을 때, Y값(TPR)이 더 클수록 좋은 cut-off point

0.545가 같은 FPR값에 대해 최적의 cut-off point !

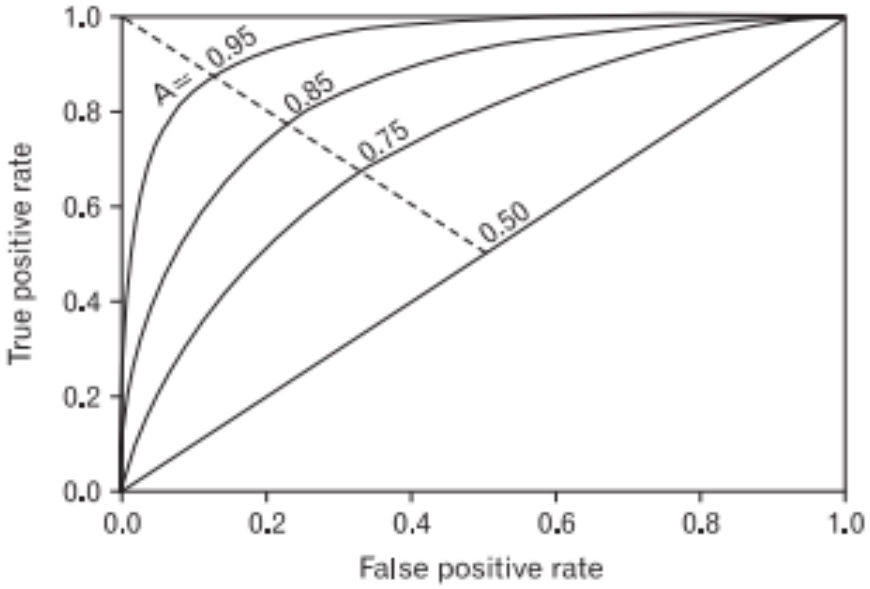
2 ROC 곡선

AUC 곡선

AUC *(Area Under Curve)*

ROC 곡선 아래의 면적으로 0~1 사이의 값을 가짐

AUC: 0.95가 가장 우수!



ROC 곡선이 볼록할수록 좋은 모델이므로

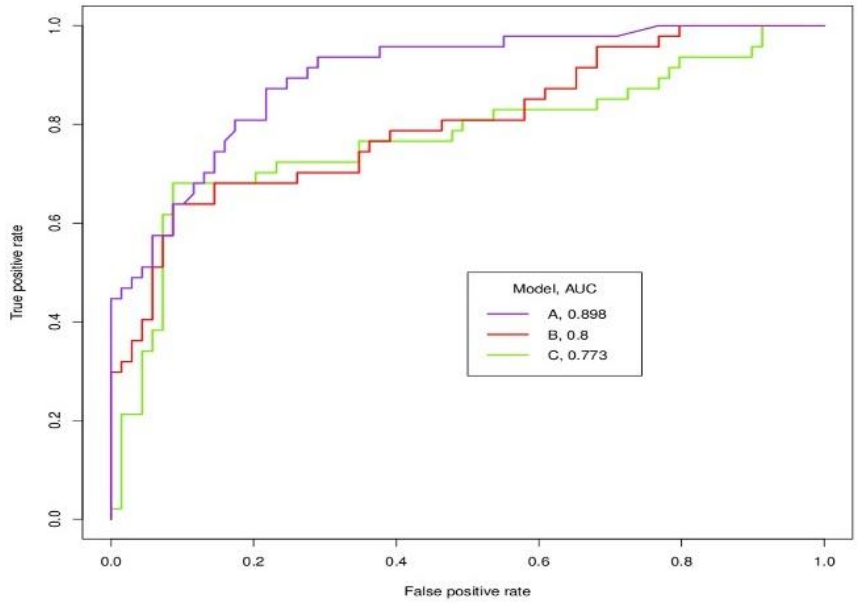
AUC 값이 클수록 모델의 성능이 **우수** !

2 ROC 곡선

AUC 곡선

AUC *(Area Under Curve)*

ROC 곡선 아래의 면적으로 0~1 사이의 값을 가짐



각 AUC를 계산해 보았을 때

가장 볼록한 형태의 A 모델이

0.898로 가장 높음

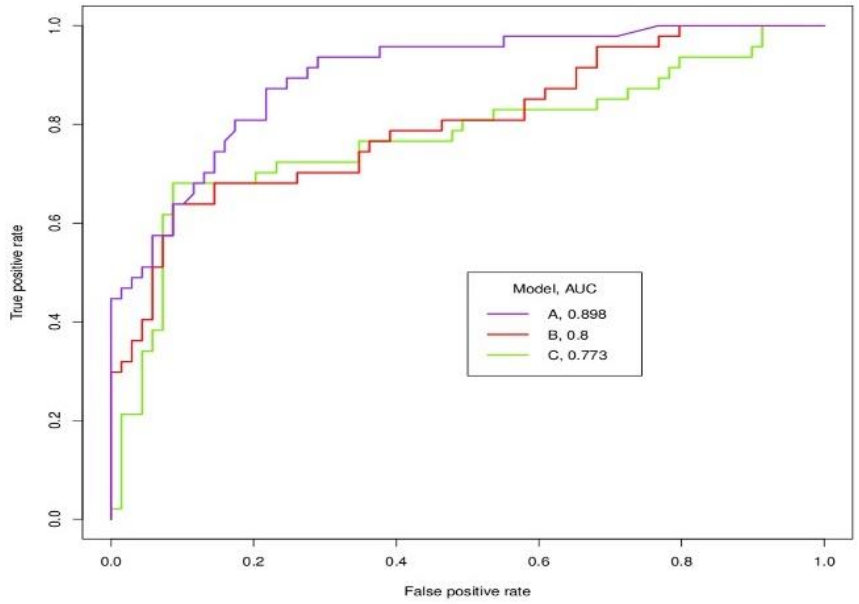
A 모델의 성능이 가장 좋음 !

2 ROC 곡선

AUC 곡선

AUC *(Area Under Curve)*

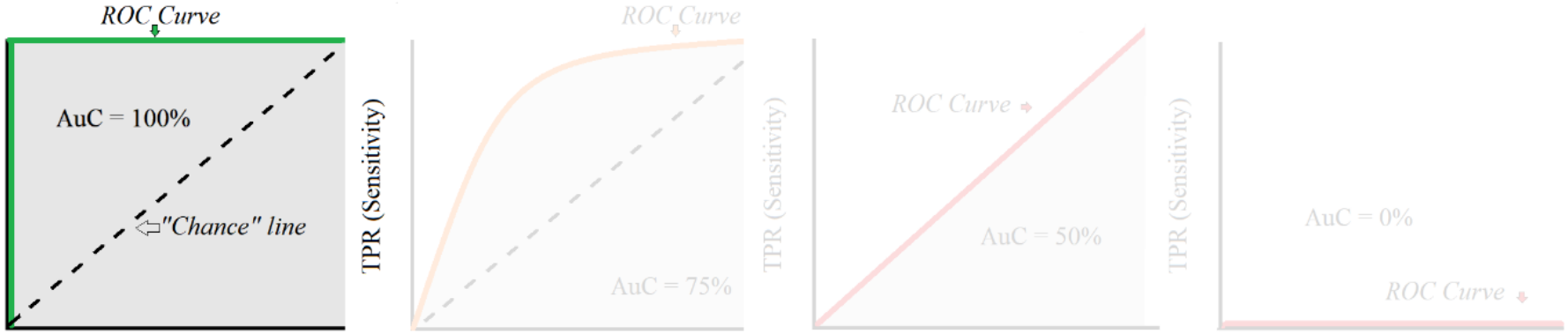
ROC 곡선 아래의 면적으로 0~1 사이의 값을 가짐



ROC curve가 모든
cut-off point를 고려했기 때문에
AUC도 cut-off point와 상관없이
모델의 성능 측정 가능 !

2 ROC 곡선

AUC의 해석



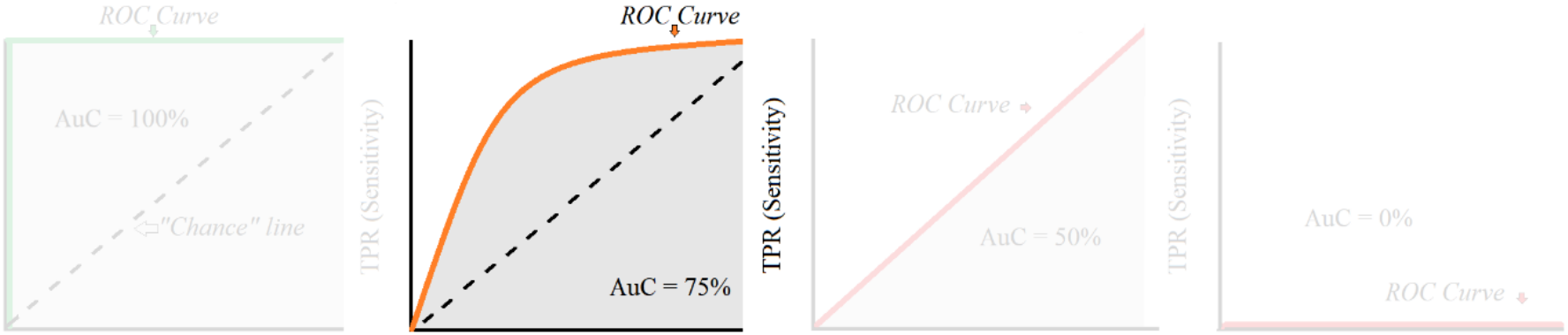
AUC = 1

모델을 100% 정확히 예측했다는 의미로

모델이 **과적합(Overfitting)**된 것은 아닌지 확인해야 함

2 ROC 곡선

AUC의 해석



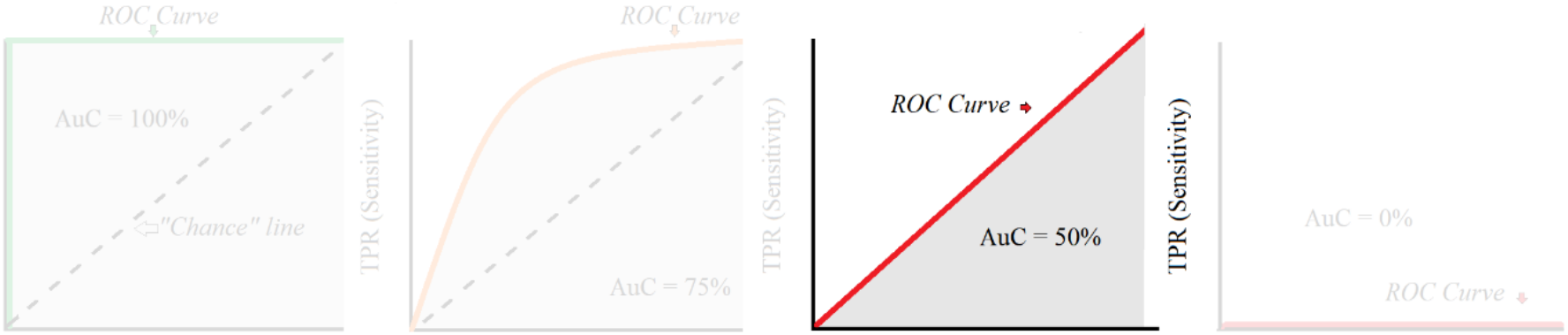
AUC = 0.75

모델이 실제 값을 75% 수준으로 맞췄다는 의미로

일반적으로 AUC가 **0.8 이상이면 성능이 우수**하다고 함

2 ROC 곡선

AUC의 해석



AUC = 0.5

모델이 실제 값을 50% 맞췄다는 의미로

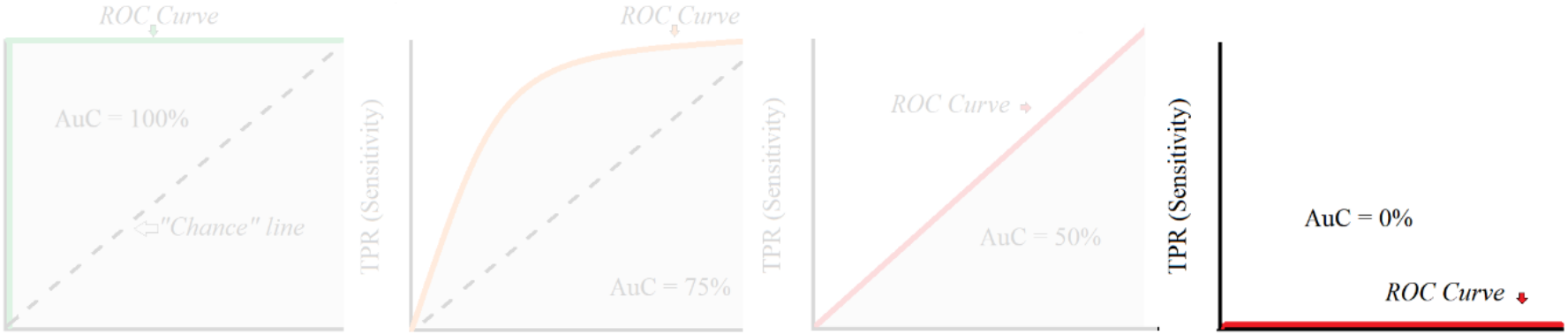
무작위 예측과 다름이 없으며 보통 AUC는 0.5 이상의 값을 보여야 정상임

0.5보다 낮은 값이 나왔다면 분류를 반대로 진행했을 가능성이 큼

즉 Y=1과 Y=0을 거꾸로 예측한 것

2 ROC 곡선

AUC의 해석



AUC = 0

모델이 100% 반대로, 즉 Y=1과 Y=0을 반대로 예측했다는 의미

히이잉

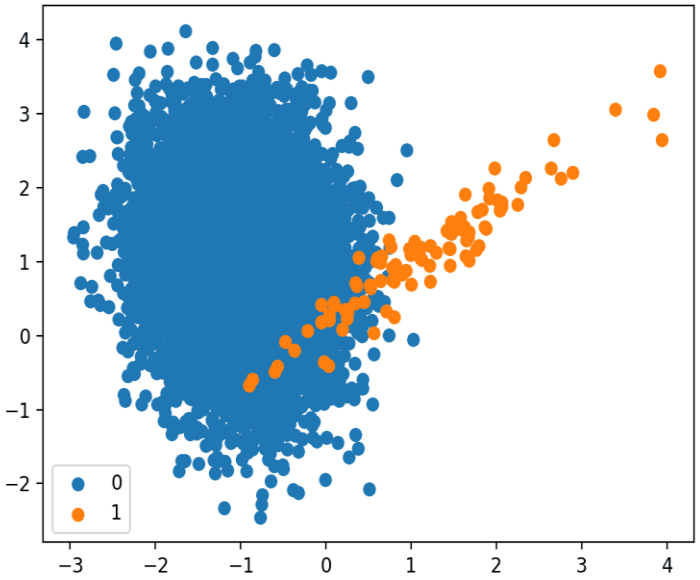
3

샘플링

샘플링

클래스 불균형

각 수준(클래스)에 따른 관측치 개수의 차이가 큰 경우



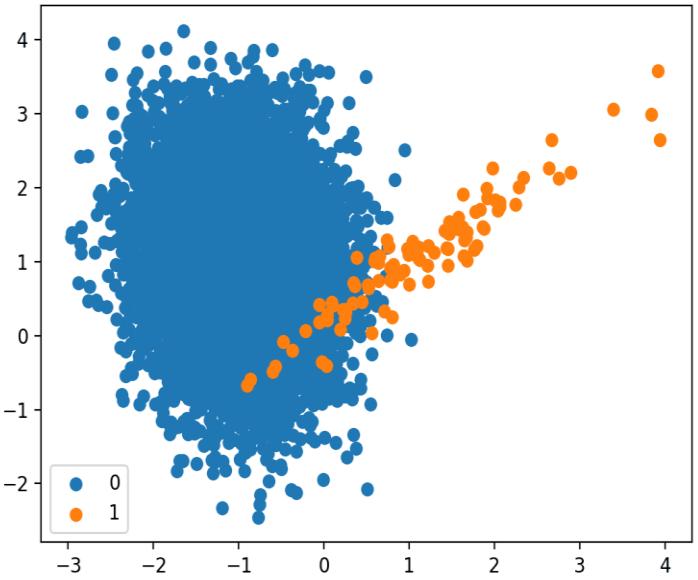
0인 클래스가 1인 클래스에 비해
훨씬 많이 관측됨 (클래스 불균형)

샘플링을 통해 해결 !

샘플링

클래스 불균형

각 수준(클래스)에 따른 관측치 개수의 차이가 큰 경우



0인 클래스가 1인 클래스에 비해
훨씬 많이 관측됨 (클래스 불균형)

샘플링을 통해 해결 !

3 샘플링

샘플링의 필요성

클래스 불균형을 조정해야 하는 이유

불균형 데이터로 모델을 학습시켜 예측할 경우
모델의 성능을 정확히 파악하기 어렵기 때문

Y=1인 관측치가 95개, Y=0인 관측치가 5개인 데이터가 있을 때
모델이 모두 $\hat{Y} = 1$로 예측할 경우
정확도는 95%지만 Y=0을 전혀 예측하지 못했으므로
성능이 우수하다고 말하기는 어려움

3 샘플링

샘플링의 필요성

클래스 불균형을 조정해야 하는 이유

불균형 데이터로 모델을 학습시켜 예측할 경우
모델의 성능을 정확히 파악하기 어렵기 때문

Y=1인 관측치가 95개, Y=0인 관측치가 5개인 데이터가 있을 때
모델이 모두 $\hat{Y} = 1$로 예측할 경우
정확도는 95%지만 Y=0을 전혀 예측하지 못했으므로
성능이 우수하다고 말하기는 어려움

샘플링의 필요성

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	5
	$\hat{Y}=0$	4	5

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.55

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	50
	$\hat{Y}=0$	60	50

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.509

샘플링의 필요성

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	5
	$\hat{Y}=0$	4	5

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.55

>

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	50
	$\hat{Y}=0$	60	50

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.509

정확도는 **관측치가 많은 수준의 영향**을 받으므로

모델의 성능을 올바르게 평가하지 못할 수 있음

3 샘플링

샘플링의 필요성

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	5
	$\hat{Y}=0$	4	5

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.55

		관측값(Y)	
		$Y=1$	$Y=0$
예측값 ($\hat{Y}$)	$\hat{Y}=1$	6	50
	$\hat{Y}=0$	60	50

Y=1 수준에서의 정확도: 0.6

Y=0 수준에서의 정확도: 0.5

혼동행렬의 전체 정확도: 0.509

따라서 소수의 클래스에 특별히 더 관심이 있는 경우

샘플링을 통한 클래스 불균형 해소가 필수적 !

클래스 간 불균형을 무시하고 모델을 적합하게 된다면

특정 클래스에 **과적합**될 수 있으니 조심 !

정확도는 **관측치가 많은 수준의 영향**을 받으므로

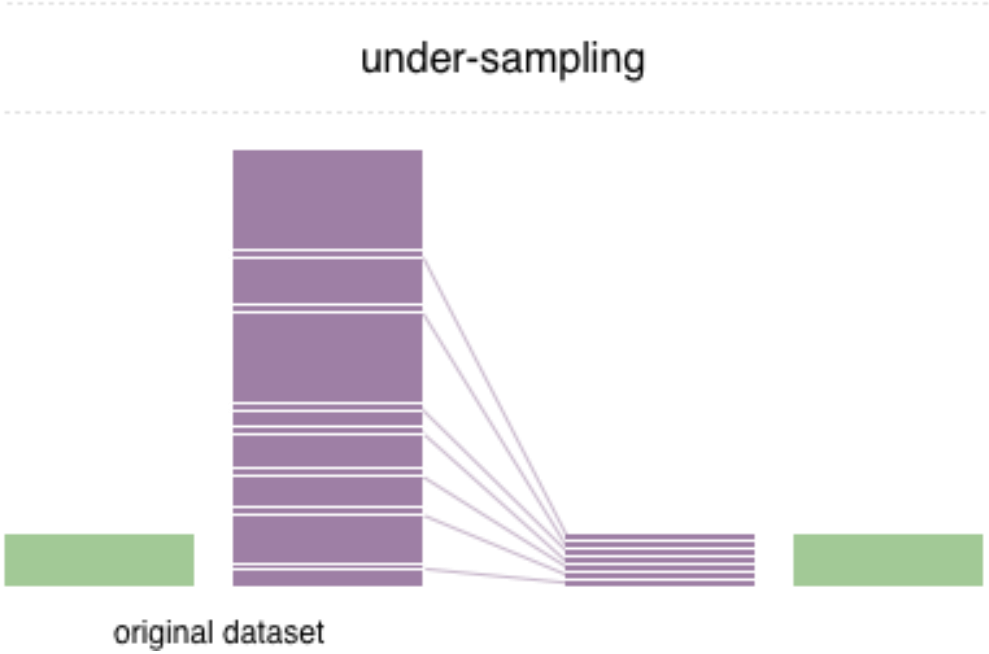
모델의 성능을 올바르게 평가하지 못할 수 있음

언더 샘플링

언더 샘플링 *(Under Sampling)*

소수의 클래스는 변형하지 않고,

다수의 클래스를 소수의 클래스에 맞추어 관측치를 감소시키는 방법



3 샘플링

언더 샘플링

언더 샘플링 *(Under Sampling)*

소수의 클래스는 변형하지 않고,

다수의 클래스를 소수의 클래스에 맞추어 관측치를 감소시키는 방법

장점

데이터 사이즈가 줄어들어 **메모리 사용이나 처리 속도**에 있어 유리

단점

관측치 손실로 **정보가 누락**되는 문제 발생

3 샘플링

언더 샘플링의 종류

Tomek Links Method

두 클래스 간 경계에 있는 데이터를 제거하는 방법

Tomek Link로 묶이는 값이 한정적이므로 효과가 크지 않음

Random Under Sampling

랜덤으로 다수의 클래스에 해당하는 데이터를 제거하는 방법

추출된 샘플들이 기존 데이터에 대해 **대표성**을 띄지 못할 수 있음

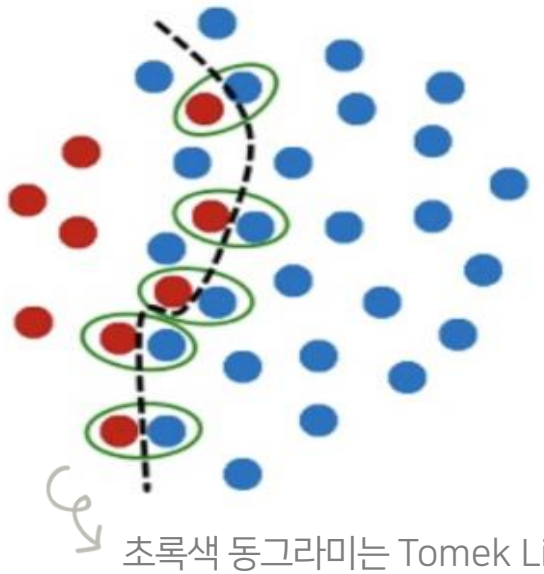
3 샘플링

언더 샘플링의 종류

Tomek Links Method

두 클래스 간 경계에 있는 데이터를 제거하는 방법

Tomek Link로 묶이는 값이 한정적이므로 효과가 크지 않음



초록색 동그라미는 Tomek Link가 있는 점들을 묶어 놓은 것!

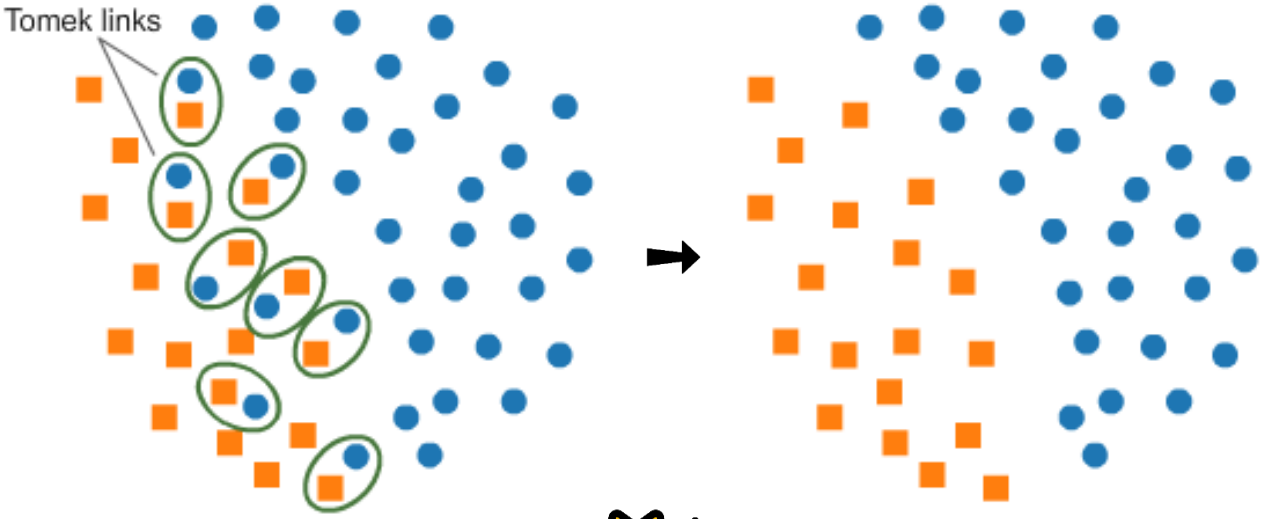
임의로 서로 다른 클래스의 두 점을 연결하고

해당 거리가 주위의 다른 데이터와

서로 연결한 거리보다 짧다면

두 점 간 Tomek Link가 존재 !

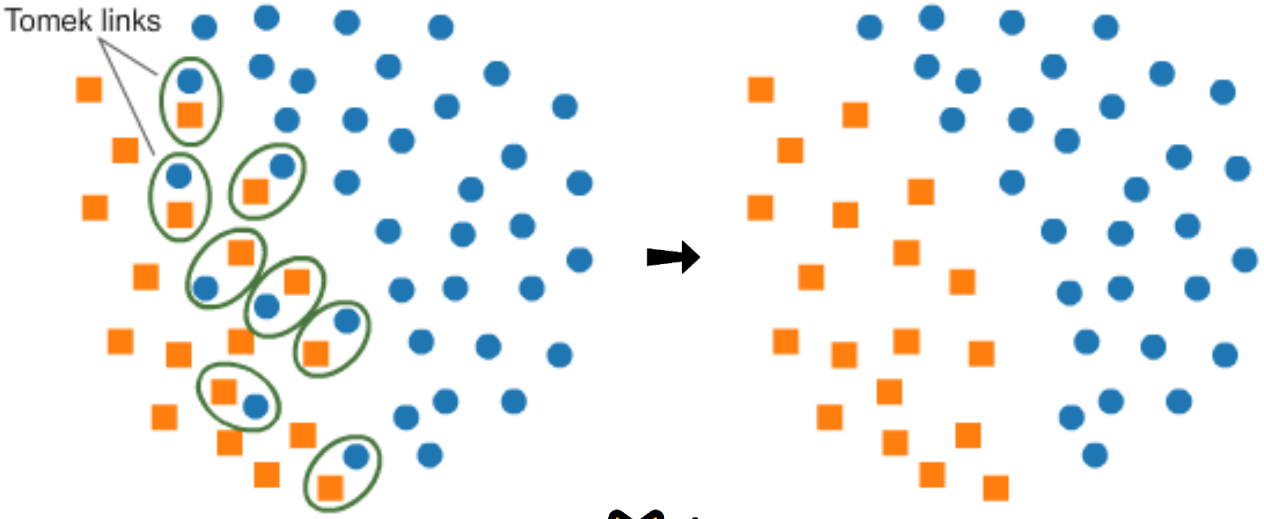
Tomek Links Method



초록색 동그라미로 묶인 데이터 쌍에서

다수의 클래스에 속한 데이터들을 삭제

Tomek Links Method

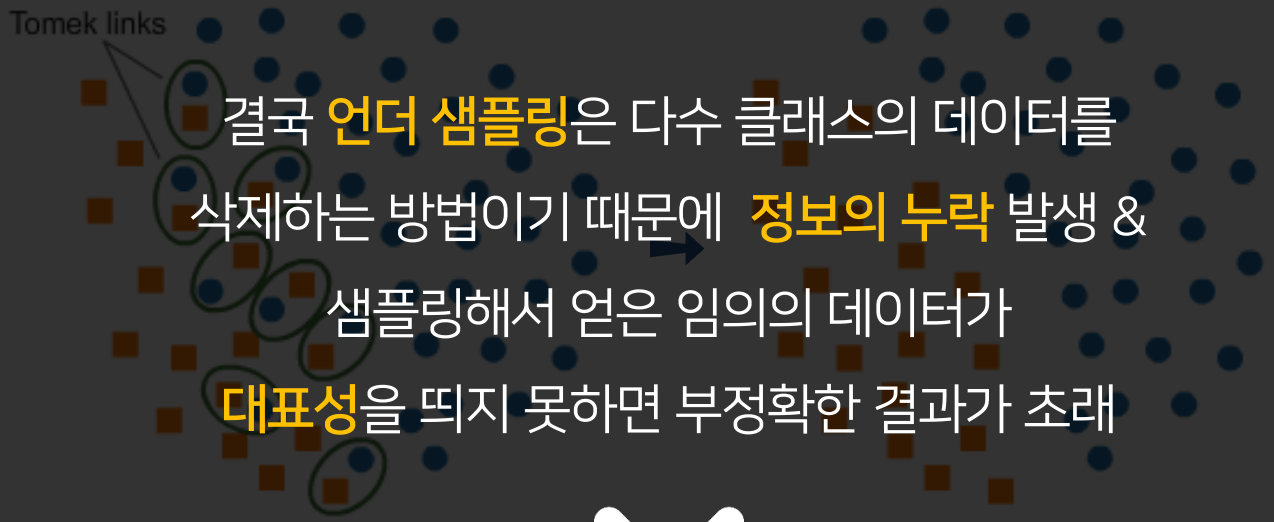


분포가 높은 클래스의 중심분포는 어느 정도 유지하며 경계선을 조정

랜덤 언더 샘플링보다 **정보의 유실을 방지**하지만 **언더 샘플링의 효과가 크지 않음**

3 샘플링

Tomek Links Method



결국 **언더 샘플링**은 다수 클래스의 데이터를
삭제하는 방법이기 때문에 **정보의 누락** 발생 &
샘플링해서 얻은 임의의 데이터가
대표성을 띄지 못하면 부정확한 결과가 초래

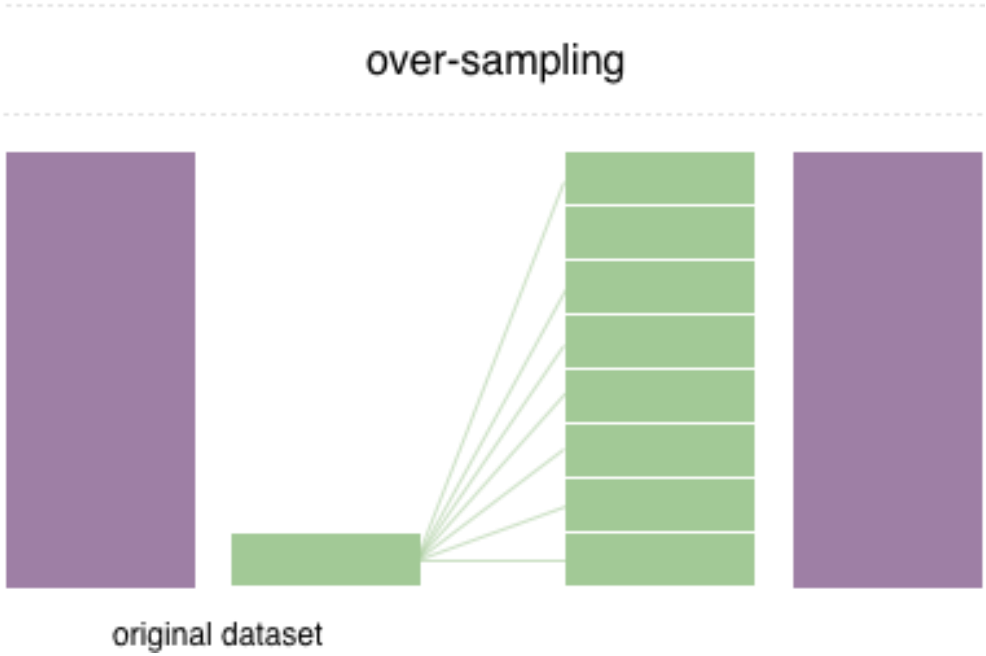
오버 샘플링 이용 !

초록색 동그라미 안의 데이터 쌍에서
다수의 클래스에 속한 데이터들을 삭제함으로써
데이터들의 크기를 줄이는 방법

오버 샘플링

오버 샘플링 *(Over Sampling)*

소수의 클래스를 다수의 클래스에 맞추어 관측치를 증가시키는 방법



3 샘플링

오버 샘플링

오버 샘플링 *(Over Sampling)*

소수의 클래스를 다수의 클래스에 맞추어 관측치를 증가시키는 방법

장점

정보의 손실이 발생하지 않아 일반적으로 언더 샘플링보다 성능이 좋음

단점

다수의 클래스에 맞도록 데이터가 커지기 때문에

메모리 사용이나 처리 속도 측면에서 상대적으로 불리

3 샘플링

오버 샘플링의 종류

Random Over Sampling

랜덤으로 소수 클래스의 데이터를 복제하는 방법

동일한 데이터의 수가 늘어나 **과적합**될 가능성이 큼

SMOTE *(Synethetic Minority Over-sampling Method)*

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

(1) 소수 클래스 중 **무작위로 데이터 X**를 선택

오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

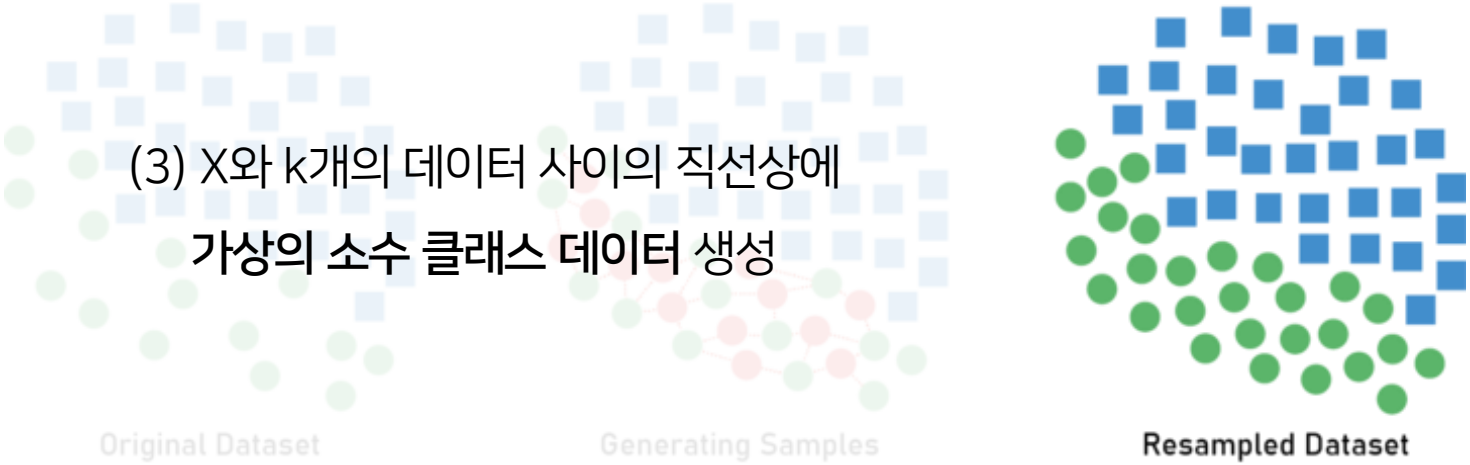
(2) X를 기준으로 소수 클래스에서 **k개의 가장 가까운 데이터**를 탐색 후 선택 (KNN 활용)

오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

(3) X와 k개의 데이터 사이의 직선상에
가상의 소수 클래스 데이터 생성



오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

SMOTE는 데이터를 단순 복사하는 **Random Over Sampling**보다
과적합이 발생할 위험이 적음 !

3 샘플링

오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

하지만 **소수 클래스의 데이터 간 거리만 고려**하기 때문에
새로 생성된 데이터가 다른 클래스의 데이터와 겹치거나
노이즈가 발생할 위험 존재 !

따라서 **고차원 데이터**에서는 효율적이지 않음

3 샘플링

오버 샘플링의 종류

SMOTE (Synethetic Minority Over-sampling Method)

소수 범주의 데이터를 가상으로 만들어내는 방법

하지만 **소수 클래스의 데이터 간 거리만 고려**하기 때문에
새로 생성된 데이터가 다른 클래스의 데이터와 겹치거나
노이즈가 발생할 위험 존재 !

따라서 **고차원 데이터**에서는 효율적이지 않음

4

인코딩

인코딩

인코딩 *(Encoding)*

범주형 자료를 **수치화**하는 과정

사용자가 입력한 문자나 기호들을 **컴퓨터가 이용할 수 있는 신호로 변환**

범주형 데이터는 주로 문자열, 기호로 표현되어 있으므로
문자열 그대로 모델을 학습시키기 어렵기 때문에
수치적인 값으로 변환하는 인코딩 과정 필요

인코딩

인코딩 *(Encoding)*

범주형 자료를 **수치화**하는 과정

사용자가 입력한 문자나 기호들을 **컴퓨터가 이용할 수 있는 신호로 변환**

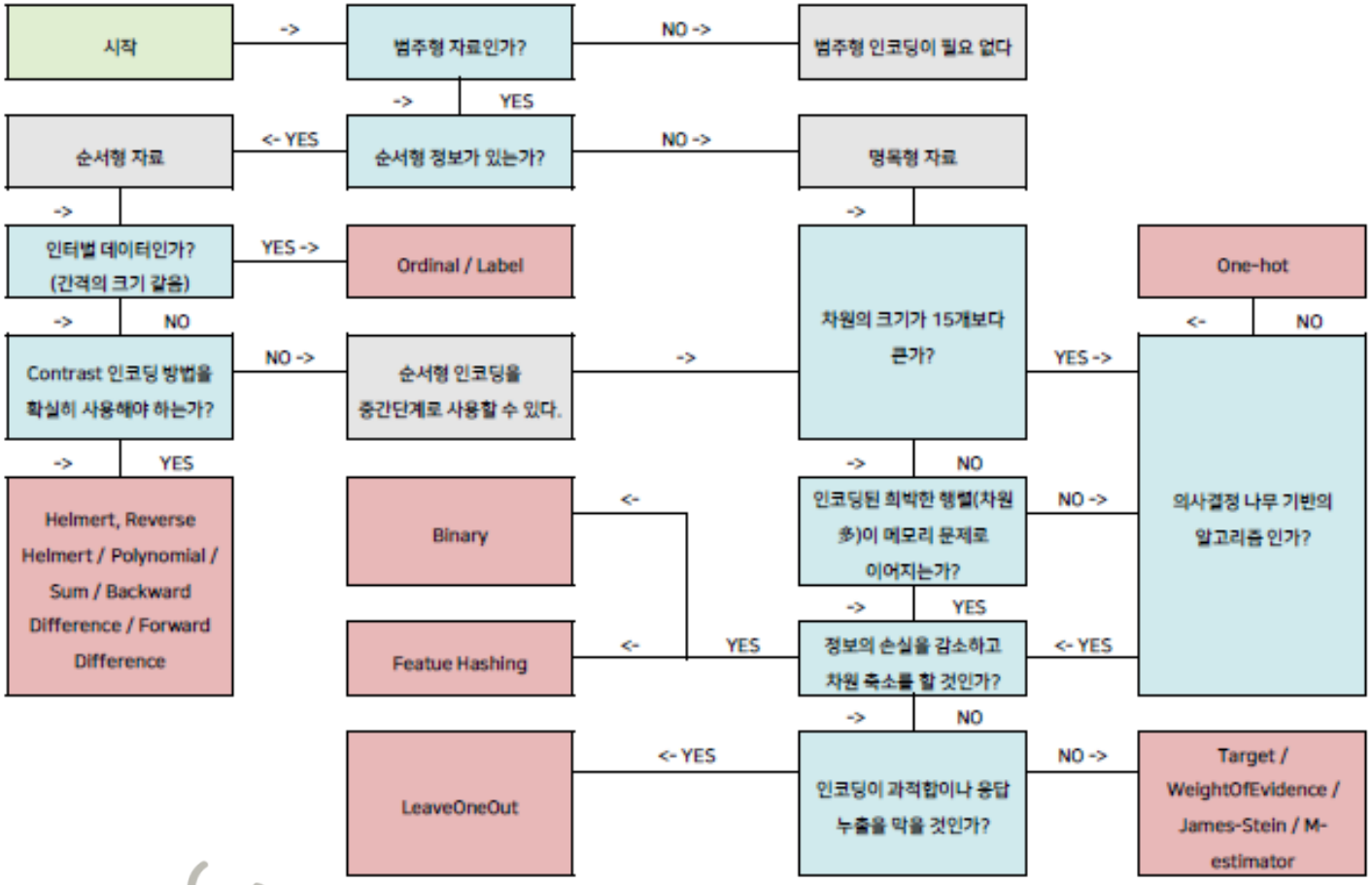
범주형 데이터는 주로 문자열, 기호로 표현되어 있으므로

문자열 그대로 모델을 학습시키기 어렵기 때문에

수치적인 값으로 변환하는 인코딩 과정 필요

4 인코딩

인코딩



상황에 따라 **적절한 인코딩 방법** 선택 !

인코딩

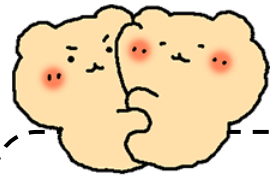
Classic	Contrast	Bayesian	기타
Ordinal	Simple	Mean (Target)	Frequency
One-Hot	Sum	Leave One Out	
Label	Helmert	Weight of Evidence	
Binary	Reverse Helmert	Weight of Evidence	
BaseN	Forward Difference	James Stein	
Hashing	Backward Difference	M-estimator	
	Orthogonal Polynomial	Ordered Target	

데이터에 따라 **적절한 인코딩 방식**을 선택해야 함 !

One-Hot Encoding

One-Hot Encoding

데이터에 **가변수(Dummy Variable)**를 추가하여
인코딩을 진행하는 기법



가변수 : 설명변수를 **0과 1로 변환**한 변수

4 인코딩

One-Hot Encoding | 예시

범주팀 팀원들
정민
현진
경미
예빈
준영

정민	현진	경미	예빈	준영
1	0	0	0	0
0	1	0	0	0
0	0	1	0	0
0	0	0	1	0
0	0	0	0	1

범주 안에 속한 각 수준들의 이름이 가변수의 명칭이 됨

클래스의 개수만큼 열을 추가하여 **해당 범주에는 1, 그 외 값에는 0** 부여

One-Hot Encoding | 예시

기준이 되는 열 삭제 !

범주팀 팀원들
정민
현진
경미
예빈
준영

정민	현진	경미	예빈	준영
1	0	0	0	0
0	1	0	0	0
0	0	1	0	0
0	0	0	1	0
0	0	0	0	1

J개의 수준을 갖는 범주형 변수를 표현하기 위해서는

J-1개의 가변수만으로 충분

4 인코딩

One-Hot Encoding | 예시

트리 기반 모델 인코딩

심주팀 팀원들	정민	현진	경미	예빈	준영
정민	1	0	0	0	0
현진	0	1	0	0	0
경미	0	0	1	0	0
예빈	0	0	0	1	0
준영	0	0	0	0	1

트리 기반 모델은 사용 가능한 모든 부분을 활용해 트리를 생성하므로

삭제된 기준 범주가 트리를 생성하는 데

중요한 요소라면 트리가 잘못 학습될 수 있음

삭제하는 가변수 없이 J개의 가변수를 생성하는 것이 좋음 !

J개의 수준을 갖는 범주형 변수를 표현하기 위해서는

J-1개의 가변수만으로 충분하기 때문

4 인코딩

One-Hot Encoding

장점

- (1) **해석이 용이**함
  - 기준 범주에 대한 정보가 intercept로 존재하기 때문에
    기준 범주를 기준으로 모델을 해석할 수 있음
- (2) **명목형 변수 값을 가장 잘 반영**하는 방법
- (3) 해당 수준에 속하는 경우만 1, 나머지는 0으로 표현되기 때문에
  다중공선성 문제를 해결할 수 있음

4 인코딩

One-Hot Encoding

고차원 범주형 자료

장점

(1) 해석이 용이함

(2) 명목형 변수 값을 가장 잘 반영하는 방법

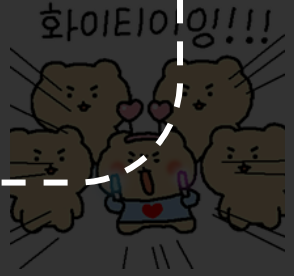
One-Hot Encoding은 너무 많은 가변수를 생성하기 때문에

데이터의 차원이 늘어나는 문제가 발생

(3) 해당 수준에 속하는 경우만 1, 나머지는 0으로 표현되기 때문에

모델의 학습 속도를 느리게 하며

상당한 computing power를 요구



4 인코딩

Label Encoding

Label Encoding

명목형 자료가 주어졌을 때 범주형 변수의 **각 수준에 점수를 할당**하는 방법

단순히 점수를 할당하므로 각 수준에 부여한 숫자들 사이에는

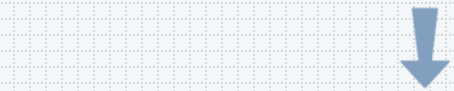
어떠한 의미나 연관성이 존재하지 않음

4 인코딩

Label Encoding | 예시

혈액형	점수
A형	1
B형	2
O형	3
AB형	4

해당 표는 혈액형이라는 범주형 변수의 각 수준에 1~4 점수를 할당한 것



할당되는 점수는 **각 수준을 구분하는 역할**일 뿐, **크기나 순서 등의 다른 의미를 가지지 않음**

또한 시작점과 간격을 분석자가 설정할 수 있음

4 인코딩

Label Encoding

장점

Label Encoding은 One-Hot Encoding과 달리
가변수를 생성하지 않아 **차원이 늘어나지 않기 때문에** 빨리 학습할 수 있음

단점

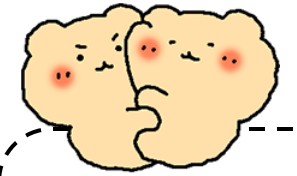
할당된 점수에 순서나 연관성이 있다고 잘못 판단해
정보 왜곡이 발생할 수 있음

Ordinal Encoding

Ordinal Encoding

순서형 자료가 주어졌을 때

각 순서에 대응하는 점수를 차등적으로 할당하는 방식



Label Encoding과는 달리, 할당된 점수들 간 **순서나 연관성 존재**

Ordinal Encoding | 예시

만족도	점수
매우 별로	1
별로	2
보통	3
좋음	4
매우 좋음	5

만족도의 각 수준에 1~5 점수를 할당

일반적으로 1부터 시작해 **차등적으로 점수**를 부여,

각 점수는 순서를 반영함

4 인코딩

Ordinal Encoding

장점

Label Encoding처럼 **차원이 늘어나지 않으므로**
모델이 데이터를 빠르게 처리할 수 있음

단점

범주 내 **수준 간 차이를 정확히 반영하기 어려움**
차이를 명확히 반영하기 위해서는
해당 데이터에 대한 도메인을 명확히 파악해야 함

4 인코딩

Ordinal Encoding

장점

Label Encoding처럼 차원이 늘어나지 않으므로
모델이 데이터를 빠르게 처리할 수 있음

앞선 인코딩 방법들은
범주형 변수의 각 수준을 구별하는 것에 초점을 맞추고 있음

단점

범주 내 수준 간 차이를 정확히 반영하기 어려움
차이를 명확히 반영하기 위해서는
해당 데이터에 대한 도메인을 명확히 파악해야 함

다음으로 소개할 3가지 **Target Encoding**은,

범주형 변수의 각 수준을 구별할 뿐만 아니라
해당 변수와 반응 변수 간의 **수치적인 관계를 반영해 인코딩을 진행**

Mean Encoding

Mean Encoding

Target Encoding의 일종으로,

범주형 변수의 각 수준에서 도출된 **반응변수의 평균**으로

수준별 점수를 할당하는 인코딩 방식

4 인코딩

Mean Encoding | 예시

[Y] 키(cm)	[X] 학과	[X] Mean Encoding
168	경영	172
180	경영	172
168	경영	172
174	통계	166
156	통계	166
163	통계	166
171	통계	166
165	경제	171.66
180	경제	171.66
170	경제	171.66

반응변수가 키(cm),
범주형 설명변수가 학과일 때
Mean Encoding을 적용한 예시

학과라는 범주형 변수 대신
클래스별 반응변수에 대한 **평균으로**
인코딩을 진행

Mean Encoding | 장점

앞선 Encoding 기법들과 달리 설명변수와 **반응변수 간의 관계를 고려하여 점수를 할당**하였다는 점에서 당위성을 가짐

One-Hot Encoding과 달리 **차원이 증가하지 않아** 학습 속도가 빠름

Mean Encoding | 한계점

Train set에 없던 새로운 수준이 Test set에 등장하면 활용할 수 없음

이상치에 취약함

Data Leakage가 발생하여 모델을 학습시킬 때 **과적합**이 발생할 위험이 있음

관측치 값이 적은 범주의 경우 모델링에 부정확한 결과가 도출될 가능성이 있음

Mean Encoding | 한계점

Train set에 없던 새로운 수준이 Test set에 등장하면 활용할 수 없음

기존의 예시에서, Test set의 학과라는 변수에
'데이터사이언스'라는 새로운 수준이 있다면 점수 할당이 어려움

Mean Encoding | 한계점

이상치에 취약함

반응변수가 지나치게 크거나 작을 경우도 포함해 **평균**을 내기 때문에,
이상치의 영향을 많이 받음

Mean Encoding | 한계점

Data Leakage가 발생하여 모델을 학습시킬 때 **과적합**이 발생할 위험이 있음

설명변수를 인코딩하기 위해 반응변수 값을 활용하기 때문에

Data Leakage가 발생할 수 있음

Data Leakage: 데이터가 누출된 것

즉, 반응변수 Y에 대한 정보가 모델 학습 시 train feature에 들어가는 것

Mean Encoding | 한계점

관측치 값이 적은 범주의 경우 모델링에 부정확한 결과가 도출될 가능성이 있음

예를 들어, Train set에서 5개 만으로 진행한 Encoding 값이
Test set에서 관측된 50개의 데이터를 **대표**한다고 하기 어려움

Leave-One-Out Encoding

Leave-One-Out Encoding

인코딩하고자 하는 현재 행을 제외한 **나머지 행들의 평균**을 구해,
해당 값을 할당하는 방식

현재 행이 이상치라면, 이 값을 제외하고 평균을 구하기 때문에
이상치의 영향을 덜 받게 됨

Leave-One-Out Encoding | 예시

[Y] 키(cm)	[X] 학과	[X] LOO Encoding
168	경영	174
180	경영	168
168	경영	174
174	통계	163.33
156	통계	169.33
163	통계	167
171	통계	164.33
165	경제	175
180	경제	167.5
170	경제	172.5

경영학과에서 키가 168인 학우의 경우,
자신을 제외한 나머지 2개 행의
반응변수 값의 평균인 174를 할당

Mean Encoding과 같이
수준별 평균을 구해 점수를 할당하지만,
현재 행을 제외한 평균을 구하므로
같은 수준에 대해
서로 다른 값이 할당될 수 있음

Leave-One-Out Encoding | 장점

이상치의 영향을 덜 받음

앞선 Mean Encoding과 같은 장점을 가지면서, 한계점을 일부 극복함

모든 반응변수의 정보가 다 반영되지 않기 때문에

과적합의 가능성이 Mean Encoding보다 낮음

Leave-One-Out Encoding | 한계점

- **Train set에 없던 새로운 수준**이 Test set에 등장하면 활용할 수 없음
- **이상치**에 취약함
- Data Leakage가 발생하여 모델을 학습시킬 때 **과적합**이 발생할 위험이 있음
- **관측치 값이 적은 범주**의 경우 모델링에 부정확한 결과가 도출될 가능성이 있음

Mean Encoding과 동일한 한계점을 지님 !

Ordered Target Encoding

Ordered Target Encoding

같은 수준에 속한 행들 중

현재 행 이전 행 값들의 평균을 점수로 할당하는 방식

범주형 변수가 많은 데이터 처리에 유용한 부스팅 모델인

CatBoost에서 사용하는 방식으로 **CatBoost Encoding**이라고도 불림

Ordered Target Encoding | 예시

[Y] 키	[X] 학과	Mean Encoding	Ordered Target Encoding
168	경영	172	169.5
174	통계	166	169.5
165	경제	171.66	169.5
156	통계	166	174
180	경영	172	168
163	통계	166	165
180	경제	171.66	165
170	경제	171.66	172.5
168	경영	172	174
171	통계	166	164.33

각 수준의 첫번째 행은 같은 수준에 해당하는 이전 값이 없으므로 전체 평균을 구해 할당

두번째 통계학과 행에는 유일한 이전 행인 첫 번째 통계학과 반응변수 값 174를 할당

세번째 통계학과 행은 앞선 두 통계학과 학우들의 키 평균을 구해

$\frac{174+156}{2}$ = 165 할당

Ordered Target Encoding | 예시

[Y] 키	[X] 학과	Mean Encoding	Ordered Target Encoding
168	경영	172	169.5
174	통계	166	169.5
165	경제	171.66	169.5
156	통계	166	174
180	경영	172	168
163	통계	166	165
180	경제	171.66	165
170	경제	171.66	172.5
168	경영	172	174
171	통계	166	164.33

각 수준의 첫번째 행은 같은 수준에 해당하는 이전 값이 없으므로 전체 평균을 구해 할당

두번째 통계학과 행에는 유일한 이전 행인 첫 번째 통계학과 반응변수 값 174를 할당

세번째 통계학과 행은 앞선 두 통계학과 학우들의 키 평균을 구해

$\frac{174+156}{2} = 165$ 할당

Ordered Target Encoding | 예시

[Y] 키	[X] 학과	Mean Encoding	Ordered Target Encoding
168	경영	172	169.5
174	통계	166	169.5
165	경제	171.66	169.5
156	통계	166	174
180	경영	172	168
163	통계	166	165
180	경제	171.66	165
170	경제	171.66	172.5
168	경영	172	174
171	통계	166	164.33

각 수준의 첫번째 행은 같은 수준에 해당하는 이전 값이 없으므로 전체 평균을 구해 할당

두번째 통계학과 행에는 유일한 이전 행인 첫 번째 통계학과 반응변수 값 174를 할당

세번째 통계학과 행은 앞선 두 통계학과 학우들의 키 평균을 구해

$$\frac{174+156}{2} = 165$$ 할당

Ordered Target Encoding | 예시

[Y] 키	[X] 학과	Mean Encoding	Ordered Target Encoding
168	경영	172	169.5
174	통계	166	169.5
165	경제	171.66	169.5
156	통계	166	174
180	경영	172	168
163	통계	166	165
180	경제	171.66	165
170	경제	171.66	172.5
168	경영	172	174
171	통계	166	164.33

Mean Encoding과 달리

Ordered Target Encoding은

같은 수준에 해당하는 행이라도

다른 값이 할당될 수 있음

즉, 각 행에 더 **다양한 값이 할당**됨

4 인코딩

Ordered Target Encoding 예시

[Y] 키	[X] 학과	Mean Encoding	Ordered Target Encoding
168	경영	172	169.5
174	통계	166	169.5
165	경제	171.66	169.5
156	통계	166	174
180	경영	172	168
163	통계	166	165
180	경제	171.66	165
170	경제	171.66	172.5
168	경영	172	174
171	통계	166	164.33

한계점

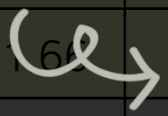
데이터 샘플의 순서에 따라 인코딩 방식이 달라지기 때문에,

데이터의 순서가 중요한 영향을 미칠 수 있음

만약 데이터가 시간적 순서나 특정 패턴에 의존하는 경우,

CatBoost의 기본 설정(랜덤 순서 섞기)이

원본 데이터의 순서를 왜곡할 수 있음



시계열 데이터에 사용시 유의 !

5

공주범주

5 공주범주

EP 1 | 공주가 되.

신데렐라 정민

잠숲공 현진
(잠자는 숲속의 공주)

백설공주 준영

벨 예빈

엘사 경미

5 공주범주

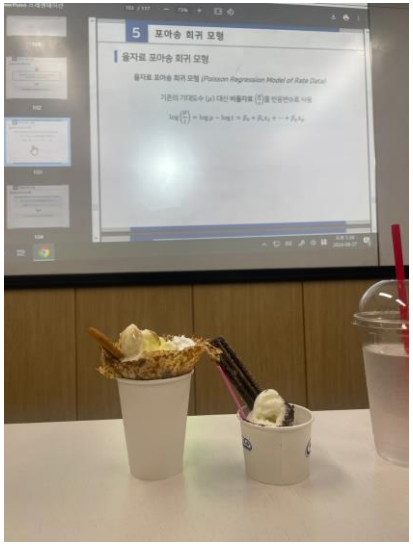
EP 2 | 공주들의 식탐

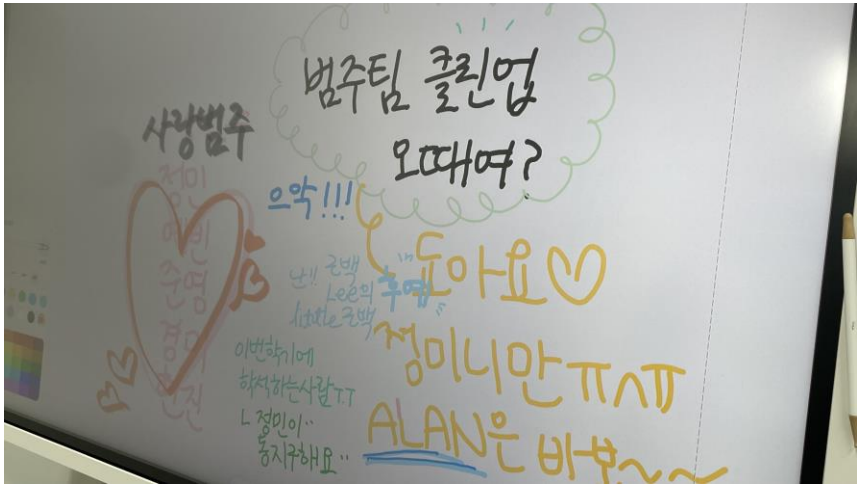
맛있는거 잘사주는
준영선생님 …

즐건 축제 ~

5 공주범주

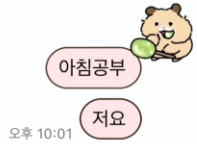
EP 3 | 공주들의 나들이





5 공주범주

특별편 | 호기심 많은 준영공주 ..



THANK YOU