Evaluation Metrics:
Measuring Model Performance

모형평가의 개념 및 고려사항

- 모형평가란
  - 고려된 서로 다른 모형들 중 어느 것이 가장 우수한 예측력을 보유하고 있는지, 선택된 모형이 '임의의 모형(random model)' 보다 우수한지 등을 비교하고 분석하는 과정을 말한다.
  - 이 때 다양한 평가지표와 도식을 활용하는데, 머신러닝 애플리케이션의 목적이나 데이터 특성에 따라 적절한 성능지표(performance measure)를 선택해야 한다.

- 모형 선택 시 고려사항
  - (일반화 가능성) 같은 모집단 내의 다른 데이터에 적용하는 경우 얼마나 안정적인 결과를 제공해 주는가?
  - (효율성) 얼마나 적은 feature를 사용하여 모형을 구축했는가?
  - (정확성) 모형이 실제 문제에 적용될 수 있을 만큼 충분한 성능이 나오는가?

Confusion Matrix

		Predicted: Negative (0)	Predicted: Positive (1)	
Actual	Negative (0)	**True Negative** **TN**	**False Positive** **FP** (Type I error)	**Specificity** $= \frac{TN}{TN + FP}$
	Positive (1)	**False Negative** **FN** (Type II error)	**True Positive** **TP**	**Recall**, **Sensitivity**, True positive rate (**TPR**) $= \frac{TP}{TP + FN}$
		Accuracy $= \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$	**Precision**, Positive predictive value (**PPV**) $= \frac{TP}{TP + FP}$	**F1-score** $= 2 \times \frac{Recall \times Precision}{Recall + Precision}$

For more information, refer to https://en.wikipedia.org/wiki/Confusion_matrix

Confusion Matrix

		Predicted		
		납입 정상 (0)	납입 연체 (1)	
Actual	납입 정상 (0)	**401**	**2**	**Specificity** $= \frac{401}{401+2}$
	납입 연체 (1)	**8**	**39**	**Recall**, **Sensitivity**, True positive rate (**TPR**) $= ?$
		Accuracy $= \frac{440}{440+10}$	**Precision**, Positive predictive value (**PPV**) $= ?$	**F1-score** $= ?$

Accuracy vs. Precision vs. Recall

- Accuracy의 한계
  - 오류 중에서 FN 오류(*ex: 연체를 정상으로 예측 / 암환자를 건강한 사람으로 예측*)를 줄이는 것이 FP 오류(*ex: 정상을 연체로 예측 / 건강한 사람을 암환자로 예측*)를 줄이는 것보다 훨씬 중요한 경우 ⇒ accuracy는 두 오류의 정도 차이를 구분할 수 없기 때문에 적절한 성능지표가 되지 못함
  - 두 클래스 중 하나(*ex: 납입 정상 / 건강한 사람*)가 다른 것(*ex: 납입 연체 / 암환자*) 보다 훨씬 많은 경우(imbalanced datasets) ⇒ random model 조차도 높은 정확도를 보이기 때문에 accuracy로는 random model과 진짜로 성능이 우수한 모형을 구분하기 어려움
- Precision vs. Recall
  - FP를 줄이는 것이 목표일 때(*ex: 임상실험을 통한 신약 치료효과 예측*)는 precision을 주로 사용
  - FN을 줄이는 것이 목표일 때는 recall을 주로 사용
  - precision과 recall은 trade-off의 관계이기 때문에, 클래스가 불균형인 경우에는 이 둘을 조화 평균한 값인 F1-score를 많이 사용

```
from sklearn.datasets import load_digits
digits = load_digits()
y = digits.target == 9  # 숫자 9를 posive class로 설정
```

```
from sklearn.model_selection import train_test_split
X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    digits.data, y, random_state=0)
```

Training Models

```
from sklearn.dummy import DummyClassifier
dummy = DummyClassifier(strategy='most_frequent').fit(X_train, y_train)
pred_dummy = dummy.predict(X_test)
```

```
from sklearn.tree import DecisionTreeClassifier
tree = DecisionTreeClassifier(max_depth=2).fit(X_train, y_train)
pred_tree = tree.predict(X_test)
```

Accuracy

```
from sklearn.metrics import accuracy_score
print("Dummy model:")
print(accuracy_score(y_test, pred_dummy))
print("Decision tree:")
print(accuracy_score(y_test, pred_tree))
```

```
Dummy model:
0.895555555556
Decision tree:
0.917777777778
```

Confusion Matrix

```
from sklearn.metrics import confusion_matrix
print("Dummy model:")
print(confusion_matrix(y_test, pred_dummy))
print("Decision tree:")
print(confusion_matrix(y_test, pred_tree))
```

```
Dummy model:
[[403   0]
 [ 47   0]]
Decision tree:
[[390  13]
 [ 24  23]]
```

Classification Report

```
from sklearn.metrics import classification_report
print("Dummy model:")
print(classification_report(y_test, pred_dummy,
                            target_names=["not 9", "9"]))
print("\nDecision tree:")
print(classification_report(y_test, pred_tree,
                            target_names=["not 9", "9"]))
```

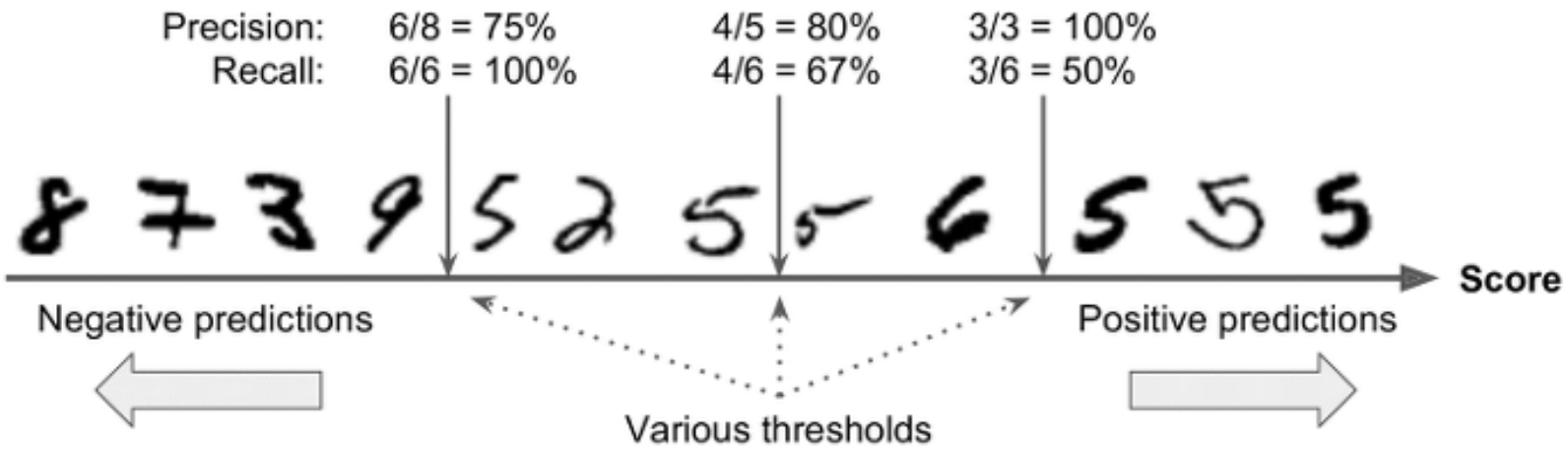
```
Dummy model:
             precision    recall  f1-score   support

      not 9       0.90      1.00      0.94       403
          9       0.00      0.00      0.00        47

avg / total       0.80      0.90      0.85       450


Decision tree:
             precision    recall  f1-score   support

      not 9       0.94      0.97      0.95       403
          9       0.64      0.49      0.55        47

avg / total       0.91      0.92      0.91       450
```

불확실성을 고려하여 예측성능 높이기

- confusion matrix에 나타나는 예측 값은 모형에 담긴 많은 정보가 이미 손실된 상태에서 제공되는 것
- scikit-learn에서 구현된 대부분의 classifier는 예측의 확실성(certainty)을 표현하기 위해 decision_function이나 predict_proba 메소드를 제공
- 이러한 메소드가 제공하는 출력 값에 임의의 임계 값을 적용하여 예측 값이 결정되는데, 이진 분류에서 decision_function은 0, predict_proba는 0.5를 default 임계 값으로 사용
  - predict_proba: 0.5 이상이면 positive class
  - decision_function: 0 보다 크면 positive class
- 분석목적에 따라 이러한 임계 값을 조정함으로써(⇒ FP와 FN이 달라짐) 원하는 평가지표*(ex: precision 또는 recall)*를 개선할 수 있음

For more details, refer to "Introduction to Machine Learning", pp.347-355

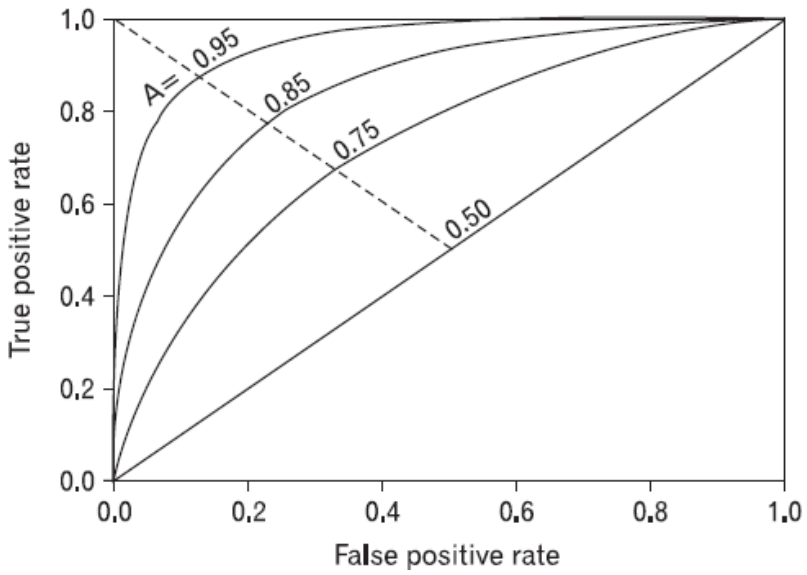
Recall precision trade-off



ROC & AUC

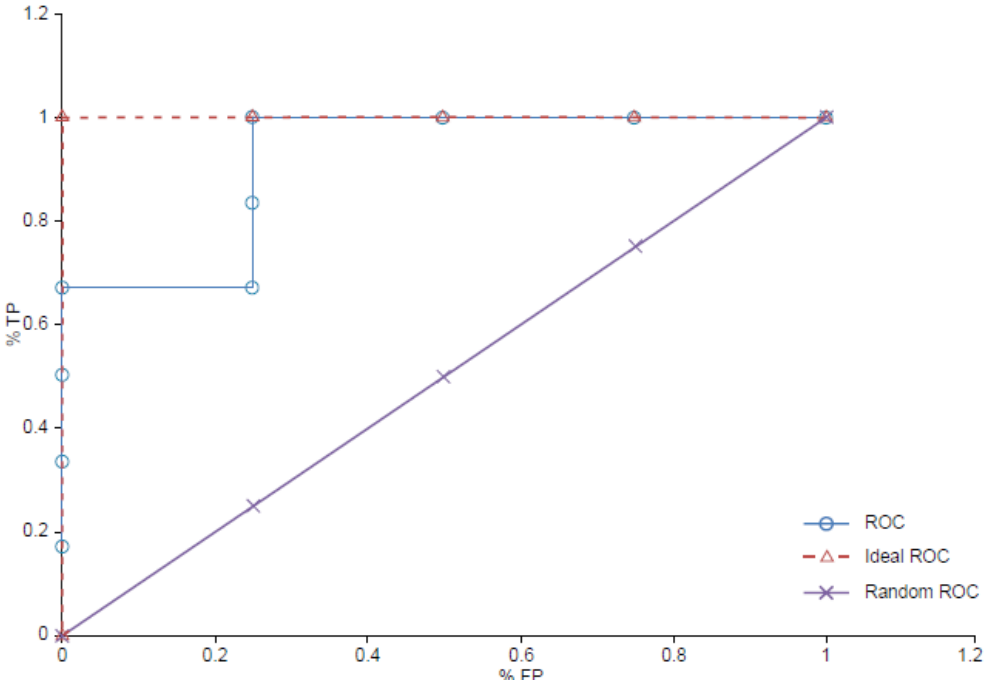
- ROC curve
  - Receiver Operating Characteristic curve
  - false positive rate(1-specificity)를 x축으로, true positive rate(recall)를 y축으로 하여 둘 간의 관계를 표현한 그래프

- AUC
  - ROC curve의 밑부분 면적(area under the ROC curve; AUC)이 넓을수록 모형 성능이 높아짐
  - Thumb rules:
    - Poor model (0.5 ~ 0.7)
    - Fair model (0.7 ~ 0.8)
    - Good model (0.8 ~ 0.9)
    - Excellent model (0.9 ~ 1.0)



ROC curve

Actual Class	Predicted Class	Confidence of "response"	Type?	Number of TP	Number of FP	Fraction of FP (X)	Fraction of TP (Y)
response	response	0.902	TP	1	0	0	0.167
response	response	0.896	TP	2	0	0	0.333
response	response	0.834	TP	3	0	0	0.500
response	response	0.741	TP	4	0	0	0.667
no response	response	0.686	FP	4	1	0.25	0.667
response	response	0.616	TP	5	1	0.25	0.833
response	response	0.609	TP	6	1	0.25	1
no response	response	0.576	FP	6	2	0.5	1
no response	response	0.542	FP	6	3	0.75	1
no response	response	0.530	FP	6	4	1	1
no response	no response	0.440	TN	6	4	1	1
no response	no response	0.428	TN				
no response	no response	0.393	TN				
no response	no response	0.313	TN				
no response	no response	0.298	TN				
no response	no response	0.260	TN				
no response	no response	0.248	TN				
no response	no response	0.247	TN				
no response	no response	0.241	TN				
no response	no response	0.116	TN				



[Source: Predictive Analytics & Data Mining, Kotu & Deshpande]

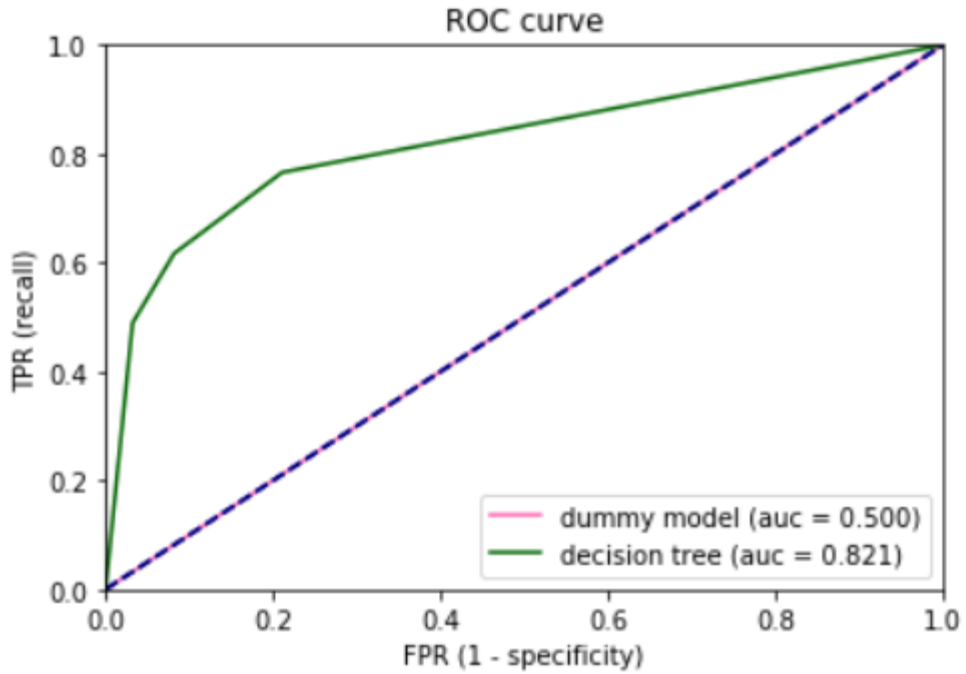
```
from sklearn.metrics import roc_curve
from sklearn.metrics import auc
%matplotlib inline
```

Define ROC curve drawing fuction

```
def plot_roc_curve(fpr, tpr, model, color=None) :
    model = model + ' (auc = %0.3f)' % auc(fpr, tpr)
    plt.plot(fpr, tpr, label=model, color=color)
    plt.plot([0, 1], [0, 1], color='navy', linestyle='--')
    plt.axis([0,1,0,1])
    plt.xlabel('FPR (1 - specificity)')
    plt.ylabel('TPR (recall)')
    plt.title('ROC curve')
    plt.legend(loc="lower right")
```

Plot multiple ROC curves

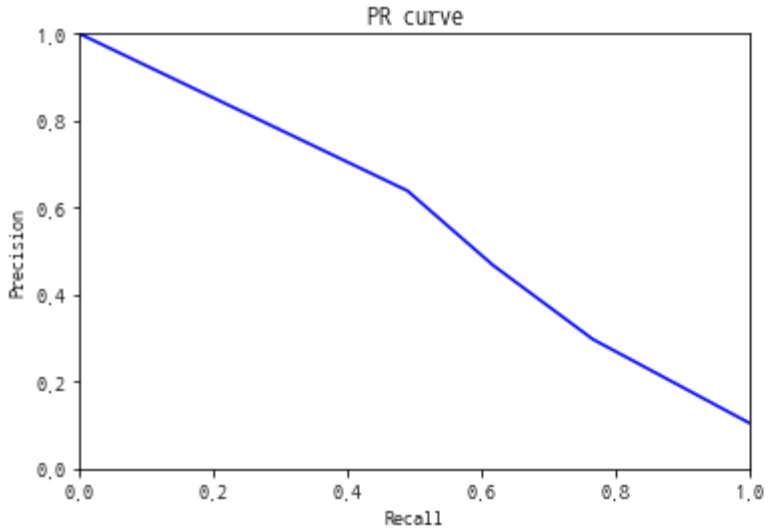
```
fpr_dummy, tpr_dummy, _ = roc_curve(y_test,
                                    dummy.predict_proba(X_test)[:,1])
plot_roc_curve(fpr_dummy, tpr_dummy, 'dummy model', 'hotpink')
fpr_tree, tpr_tree, _ = roc_curve(y_test,
                                  tree.predict_proba(X_test)[:,1])
plot_roc_curve(fpr_tree, tpr_tree, 'decision tree', 'darkgreen')
```



Precision-recall curve

```
from sklearn.metrics import precision_recall_curve

def plot_precision_recall_curve(precisions, recalls) :
    plt.plot(recalls, precisions, color='blue')
    plt.axis([0,1,0,1])
    plt.xlabel('Recall')
    plt.ylabel('Precision')
    plt.title('PR curve')
```

```
precisions, recalls, _ = precision_recall_curve(y_test,
                                    tree.predict_proba(X_test)[:,1])
plot_precision_recall_curve(precisions, recalls)
```



Other evaluation charts

- Gains Chart
  - Refer to http://mlwiki.org/index.php/Cumulative_Gain_Chart
- Lift chart
- Response Chart
- Profit Chart
- ROI Chart