



12주차: 모델의 성능 평가

ChulSoo Park

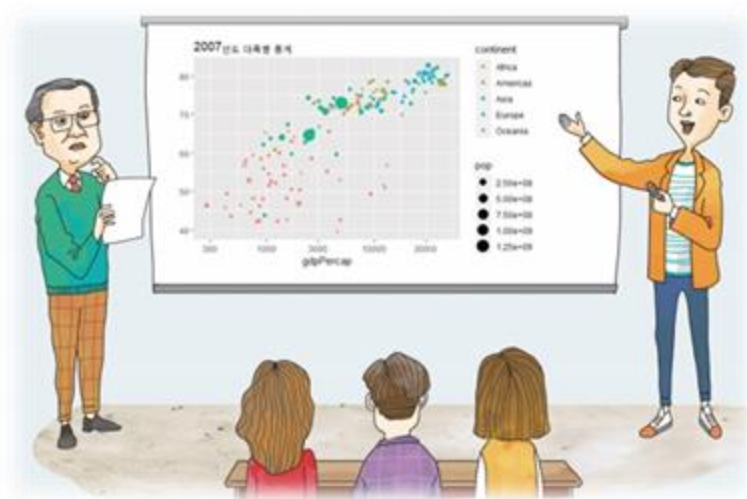
School of Computer Engineering & Information Technology
Korea National University of Transportation



10

CHAPTER

모델의 성능 평가



CONTENTS

10.1 예측 오류는 왜 발생하나?

10.2 정확률

10.3 일반화 능력 측정

10.4 교차 검증

10.5 모델 선택

10.6 정밀도와 재현율

10.7 ROC 곡선과 AUC

요약



10.3 일반화 능력 측정

■ 일반화 능력이란?

- 학습에 사용하지 않은 새로운 샘플에 대해 높은 성능을 가지는 성질
- 예)
 - ✓ 학습에 사용한 훈련 집합에 대한 정확률 : 98%
 - ✓ 새로운 샘플(현장)에 적용 : 97%의 정확률 → 일반화 능력이 뛰어 남
 - ✓ 반면 현장에서 적용하니 65%의 정확률 → 일반화 능력이 낮음



10.3 일반화 능력 측정

■ 지금까지는 학습할 때 사용한 데이터를 성능 평가에 다시 사용함

- 수업시간에 풀어본 문제를 중간, 기말고사에 그대로 출제한다면 ?
- 시험 범위는 배운 곳과 같게 하되 새로운 문제를 출제해야 제대로 평가

■ 일반화 능력 측정 방법

- 현장에 설치하여 일반화를 측정하면 좋지만, 불가능한 경우가 대부분.

예) 의료 현장

- 현재 가지고 있는 데이터를 잘 활용하여 측정해야 함

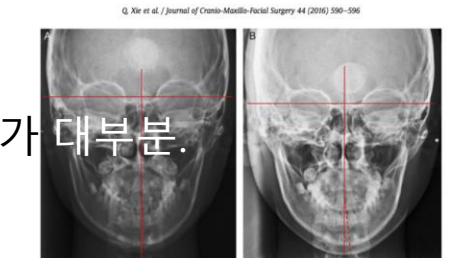
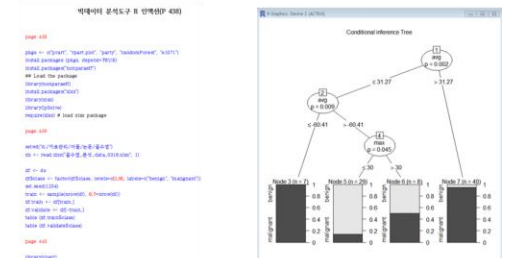


Fig. 6. Before and after PA image: A. first visit: no asymmetry was found, B. revisit: more than 5 mm skeletal asymmetry was noticed.



10.3 일반화 능력 측정

- 수집한 데이터를 훈련 집합과 테스트 집합으로 나누어 사용
 - 훈련 집합으로 모델을 학습하고, 테스트 집합으로 학습된 모델의 성능을 평가함
 - 보통 5:5, 6:4, 또는 7:3으로 나눔
- 캐글과 같은 데이터 과학 대회에서는 (1장의 [표 1-1] 대회 목록 참조)
 - 데이터를 훈련 집합과 테스트 집합으로 나눈 다음 훈련 집합을 공개
 - 테스트 집합은 정답을 빼고 공개 (정답이란 반응 변수의 값)
 - 대회 참가자는 훈련 집합으로 자신의 모델을 학습한 다음, 테스트 집합을 예측하고 예측 결과 파일을 대회 본부에 제출
 - 대회 본부는 숨겨둔 정답을 예측 결과와 비교하여 정확률을 계산함



10.3 일반화 능력 측정

2019 1st ML month with KaKR

캐글 코리아와 함께하는 1st ML 대회 - 타이타닉 생존자를 예측하라!

349 teams · 2 years ago

Overview

Data

Code

Discussion

Leaderboard

Rules

Late Submission

Overview

Description

Evaluation

Prize

Timeline

Introduction

본 대회는 구글 코리아가 후원하고, 캐글 코리아(비영리 페이스북 온라인 커뮤니티)가 진행하는 데이터 사이언스 대회입니다. Academic 목적이며, 대한민국 누구나 참여하실 수 있습니다.

Competition background

RMS 타이타닉의 침몰은 역사상 가장 악명 높은 참사 중 하나입니다. 1912 년 4 월 15 일, 첫 항해 도중 타이타닉은 빙산과 충돌 한 후 침몰하였고, 이로 인해 2224 명의 승객과 승무원 중 1502 명이 사망했습니다. 이 비극은 국제 사회에 큰 충격을 주었고, 선박 안전 규정을 개선하는 계기가 되었습니다.

많은 사망자가 생긴 이유 중 하나는 승객과 승무원을위한 구명정이 충분하지 않았기 때문입니다. 침몰에서



10.3 일반화 능력 측정

훈련 집합과 테스트 집합으로 분리

data split (70 : 30)



Random Split

X = Feature	Y = Label
1	True
1	True
1	True
2	True
2	True
2	False
3	False
3	False
3	False
3	False

Random Split

X_{train}	1	True	Y_{train}
	1	True	
	1	True	
	2	True	
	2	True	
	2	False	
X_{test}	3	False	Y_{test}
	3	False	
	3	False	
	3	False	

Random Split

1	True
1	True
1	True
2	True
2	True
2	False
3	False
3	False
3	False
3	False

label(정답) : 합격과 불합격, 이번 예는 타이타닉호 침몰 머신러닝 모델



10.3 일반화 능력 측정

Overview Data Code Discussion Leaderboard Rules

Late Submission

Data Description

File descriptions

- **train.csv** - 예측 모델을 만들기 위해 사용하는 학습셋입니다. 각 탑승객의 신상정보와 ground truth(생존유무)가 주어지며, 신상정보 및 파생변수를 토대로 생존유무를 예측하는 모델을 만듭니다.
- **test.csv** - 학습셋으로 만든 모델을 가지고 예측할 탑승객 정보가 담긴 테스트셋입니다.
- **sampleSubmission.csv** - 제출시 사용할 수 있는 csv 파일입니다.

```
>_ kaggle competitions download -c 2019-1st-ml-month-with-kakr
```

Data Explorer

90.9 KB

- sample_submission.csv
- test.csv
- train.csv

< **sample_submission.csv** (3.18 KB)

Competition Rules



10.3 일반화 능력 측정

■ iris의 예(train data와 test data로 나누기)

train data

Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width	Species
5	2	3.5	1	versicolor
5.7	4.4	1.5	0.4	setosa
7.1	3	5.9	2.1	virginica
5.6	2.5	3.9	1.1	versicolor
7.2	3.2	6	1.8	virginica
5.4	3.4	1.7	0.2	setosa
5.7	3.8	1.7	0.3	setosa

test data

Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width	Species
5.7	2.8	4.5	1.3	
5.7	2.6	3.5	1	
5.7	2.5	5	2	
5.8	4	1.2	0.2	
5.8	2.7	4.1	1	
5.8	2.7	5.1	1.9	

■ 대회에 참가했다면,

- 가진 것은 훈련 집합뿐(테스트 집합이 공개되었더라도 정답이 없어 학습에 활용 불가능)
- 훈련 집합만 가지고 일반화 능력을 어떻게 측정하나? → 훈련 집합을 전체 데이터로 간주하고 훈련 집합과 테스트 집합으로 나누어 사용함 (또는 4절의 교차 검증 활용)



10.3 일반화 능력 측정

■ 데이터를 훈련 집합과 테스트 집합으로 나누기

- iris 데이터를 7:3 비율로 나누는 코드
- sample 함수를 사용하여 랜덤하게 나눔

Console C:/RSources/ ↗

```
> n = nrow(iris) # iris 샘플 수
> n
[1] 150
> i = 1:n # 1, 2, 3, ..., n을 가진 list i
> train_list = sample(i, n*0.7) # 70%를 랜덤하게 sample 선택
> test_list = setdiff(i, train_list) # 나머지(30%)
> iris_train = iris[train_list, ] # train data select
> iris_test = iris[test_list, ] # ? test data select
```

iris_train=105 개
iris_test = 45 개

Console C:/RSources/ ↗

```
> iris_test
  Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
1           5.1          3.5           1.4          0.2   setosa
2           4.9          3.0           1.4          0.2   setosa
3           4.7          3.2           1.3          0.2   setosa
11          5.4          3.7           1.5          0.2   setosa
15          5.8          4.0           1.2          0.2   setosa
17          5.4          3.9           1.3          0.4   setosa
18          5.1          3.5           1.4          0.3   setosa
21          5.4          3.4           1.7          0.2   setosa
22          5.1          3.7           1.5          0.4   setosa
24          5.1          3.3           1.7          0.5   setosa
25          4.8          3.4           1.9          0.2   setosa
28          5.2          3.5           1.5          0.2   setosa
30          4.7          3.2           1.6          0.2   setosa
34          5.5          4.2           1.4          0.2   setosa
39          4.4          3.0           1.3          0.2   setosa
41          5.0          3.5           1.3          0.3   setosa
43          4.4          3.2           1.3          0.2   setosa
44          5.0          3.5           1.6          0.6   setosa
50          5.0          3.3           1.4          0.2   setosa
52          6.4          3.2           4.5          1.5 versicolor
54          5.5          2.3           4.0          1.3 versicolor
60          5.2          2.7           3.9          1.4 versicolor
61          5.0          2.0           3.5          1.0 versicolor
63          6.0          2.2           4.0          1.0 versicolor
64          6.1          2.9           4.7          1.4 versicolor
67          5.6          3.0           4.5          1.5 versicolor
85          5.4          3.0           4.5          1.5 versicolor
95          5.6          2.7           4.2          1.3 versicolor
97          5.7          2.9           4.2          1.3 versicolor
102         5.8          2.7           5.1          1.9 virginica
103         7.1          3.0           5.9          2.1 virginica
106         7.6          3.0           6.6          2.1 virginica
113         6.8          3.0           5.5          2.1 virginica
114         5.7          2.5           5.0          2.0 virginica
115         5.8          2.8           5.1          2.4 virginica
123         7.7          2.8           6.7          2.0 virginica
129         6.4          2.8           5.6          2.1 virginica
134         6.3          2.8           5.1          1.5 virginica
137         6.3          3.4           5.6          2.4 virginica
139         6.0          3.0           4.8          1.8 virginica
141         6.7          3.1           5.6          2.4 virginica
144         6.8          3.2           5.9          2.3 virginica
147         6.3          2.5           5.0          1.9 virginica
148         6.5          3.0           5.2          2.0 virginica
149         6.2          3.4           5.4          2.3 virginica
```

Random Split

X_train	1	True	Y_train
	1	True	
	1	True	
	2	True	
	2	True	
	2	False	
X_test	3	False	Y_test
	3	False	
	3	False	
	3	False	
	3	False	
	3	False	

Random Split

1	True	Y_train
	True	
	True	
	True	
	True	
	True	
2	False	Y_test
	False	
	False	
	False	
	False	
	False	

10.3 일반화 능력 측정

■ 랜덤 포리스트의 일반화 성능을 측정하는 코드

- randomForest 함수로 학습할 때는 훈련 집합(iris_train)을 사용 (7:3)
- predict 함수로 예측할 때는 테스트 집합(iris_test)을 사용함 **정답**
- 정확률 100% : iris data에 대해서 일반화 능력 우수

예측 결과

```
> f = randomForest(Species~., data = iris_train) # train data로 randomforest 학습
> p = predict(f, newdata=iris_test)
> p
```

1	2	3	11	15	17	18	21	22
setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa
24	25	28	30	34	39	41	43	44
setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa
50	52	54	60	61	63	64	67	85
setosa	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor
95	97	102	103	106	113	114	115	123
versicolor	versicolor	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica
129	134	137	139	141	144	147	148	149
virginica	versicolor	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica

Levels: setosa versicolor virginica

```
Console C:/RSources/
> iris_test
Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
1 5.1 3.5 1.4 0.2 setosa
2 4.9 3.0 1.4 0.2 setosa
3 4.7 3.2 1.3 0.2 setosa
11 5.4 3.7 1.5 0.2 setosa
15 5.8 4.0 1.2 0.2 setosa
17 5.4 3.9 1.3 0.4 setosa
18 5.1 3.5 1.4 0.3 setosa
21 5.4 3.4 1.7 0.2 setosa
22 5.1 3.7 1.5 0.4 setosa
24 5.1 3.3 1.7 0.5 setosa
25 4.8 3.4 1.9 0.2 setosa
28 5.2 3.5 1.5 0.2 setosa
30 4.7 3.2 1.6 0.2 setosa
34 5.5 4.2 1.4 0.2 setosa
39 4.4 3.0 1.3 0.2 setosa
41 5.0 3.5 1.3 0.3 setosa
43 4.4 3.2 1.3 0.2 setosa
44 5.0 3.5 1.6 0.6 setosa
50 5.0 3.3 1.4 0.2 setosa
52 6.4 3.2 4.5 1.5 versicolor
54 5.5 2.3 4.0 1.3 versicolor
60 5.2 2.7 3.9 1.4 versicolor
61 5.0 2.0 3.5 1.0 versicolor
63 6.0 2.2 4.0 1.0 versicolor
64 6.1 2.9 4.7 1.4 versicolor
67 5.6 3.0 4.5 1.5 versicolor
85 5.4 3.0 4.5 1.5 versicolor
95 5.6 2.7 4.2 1.3 versicolor
97 5.7 2.9 4.2 1.3 versicolor
102 5.8 2.7 5.1 1.9 virginica
103 7.1 3.0 5.9 2.1 virginica
106 7.6 3.0 6.6 2.1 virginica
113 6.8 3.0 5.5 2.1 virginica
114 5.7 2.5 5.0 2.0 virginica
115 5.8 2.8 5.1 2.4 virginica
123 7.7 2.8 6.7 2.0 virginica
129 6.4 2.8 5.6 2.1 virginica
134 6.3 2.8 5.1 1.5 virginica
137 6.3 3.4 5.6 2.4 virginica
139 6.0 3.0 4.8 1.8 virginica
141 6.7 3.1 5.6 2.4 virginica
144 6.8 3.2 5.9 2.3 virginica
147 6.3 2.5 5.0 1.9 virginica
148 6.5 3.0 5.2 2.0 virginica
149 6.2 3.4 5.4 2.3 virginica
```



10.3 일반화 능력 측정

■ 랜덤 포리스트의 일반화 성능을 측정하는 코드

- randomForest 함수로 학습할 때는 훈련 집합(iris_train)을 사용 (6:4)
- predict 함수로 예측할 때는 테스트 집합(iris_test)을 사용함
- 정확률 59/60=98.33% : iris data에 대해서 일반화 능력 우수

Console C:/RSources/ ↗

111	6.5	3.2	5.1	2.0	virginica
112	6.4	2.7	5.3	1.9	virginica
114	5.7	2.5	5.0	2.0	virginica
116	6.4	3.2	5.3	2.3	virginica
117	6.5	3.0	5.5	1.8	virginica
119	7.7	2.6	6.9	2.3	virginica
120	6.0	2.2	5.0	1.5	virginica
122	5.6	2.8	4.9	2.0	virginica
123	7.7	2.8	6.7	2.0	virginica
125	6.7	3.3	5.7	2.1	virginica
129	6.4	2.8	5.6	2.1	virginica
131	7.4	2.8	6.1	1.9	virginica
133	6.4	2.8	5.6	2.2	virginica
136	7.7	3.0	6.1	2.3	virginica
137	6.3	3.4	5.6	2.4	virginica
142	6.9	3.1	5.1	2.3	virginica
145	6.7	3.3	5.7	2.5	virginica
147	6.3	2.5	5.0	1.9	virginica
148	6.5	3.0	5.2	2.0	virginica
149	6.2	3.4	5.4	2.3	virginica

예측 결과

정답

```
> f = randomForest(Species~., data = iris_train) # train data로 randomforest 학습
> p = predict(f, newdata=iris_test)
> p
```

3	4	5	7	11	15	17	19	29
setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa
31	33	35	36	37	39	40	41	44
setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa	setosa
45	50	56	61	64	65	66	69	70
setosa	setosa	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor
74	75	76	80	86	87	89	91	93
versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	versicolor
96	97	98	100	111	112	114	116	117
versicolor	versicolor	versicolor	versicolor	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica
119	120	122	123	125	129	131	133	136
virginica	versicolor	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica
137	142	145	147	148	149			
virginica	virginica	virginica	virginica	virginica	virginica			

Levels: setosa versicolor virginica



10.3 일반화 능력 측정

- caret 라이브러리(Classification And REgression Training)
 - caret 라이브러리의 다양한 사용
 - ✓ 훈련 집합과 테스트 집합 분할
 - ✓ train 함수 (여러 회귀와 분류 모델을 일관성 있게 평가하는데 유용. 9.6.3절 참조)
 - ✓ 교차 검증 (다음 절)

Console C:/RSources/ ↗

```
> library(caret)
> train_list = createDataPartition(y = iris$Species, p = 0.6, list = FALSE)
> iris_train = iris[train_list, ]
> iris_test = iris[-train_list, ]
> f = randomForest(Species~., data = iris_train) # train data로 randomforest 학습
> p = predict(f, newdata = iris_test)
```

Console C:/RSources/ ↗

```
> r = train(Species~., data = iris, method = 'rpart')
> f = train(Species~., data = iris, method = 'rf')
> s = train(Species~., data = iris, method = 'svmRadial')
> k = train(Species~., data = iris, method = 'knn')
```



10.4 교차 검증



팀순위

◀ 2020. ▶ 현재

순위	팀	경기수 ▲	승 ▲	패 ▲	무 ▲	승률 ▼
1	NC	144	83	55	6	0.601
2	두산	144	79	61	4	0.564
3	KT	144	81	62	1	0.566
4	LG	144	79	61	4	0.564
5	키움	144	80	63	1	0.559
6	KIA	144	73	71	0	0.507
7	롯데	144	71	72	1	0.497
8	삼성	144	64	75	5	0.460
9	SK	144	51	92	1	0.357
10	한화	144	46	95	3	0.326

팀순위

◀ 2021. ▶ 현재

순위	팀	경기수 ▲	승 ▲	패 ▲	무 ▲	승률 ▼
1	삼성	33	20	13	0	0.606
2	SSG	32	18	14	0	0.563
3	NC	32	17	15	0	0.531
3	두산	32	17	15	0	0.531
3	KT	32	17	15	0	0.531
3	LG	32	17	15	0	0.531
7	KIA	32	15	17	0	0.469
8	키움	33	15	18	0	0.455
9	한화	32	13	19	0	0.406
10	롯데	32	12	20	0	0.375



■ 3절이 사용한 방법의 한계

- iris를 (7:3)으로 나누고 일반화 능력 측정
- 우연히 높은 정확률을 얻게 분할 될 수도 있고 그 반대 일 수도 있음
- 여러 번 반복하고 평균을 취하면 우연을 줄이고 통계적 신뢰성을 높일 수 있음

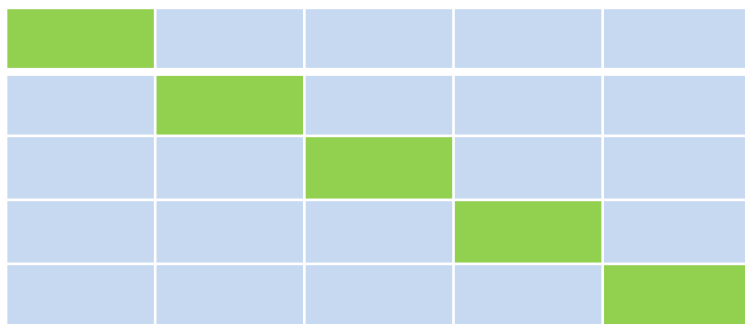
■ 여러 번 반복하는 두 가지 방법

- 부트스트랩(bootstrap): 랜덤 샘플링과 평가를 k 번 반복하고 평균을 취함
- 교차 검증: 부트스트랩 보다 교차 검증을 주로 사용



■ k -겹 교차 검증

- 데이터를 k 개 부분 집합으로 분할 ([그림]은 5-겹 교차 검증)
- 학습과 평가를 k 번 반복하고, 평균을 취함

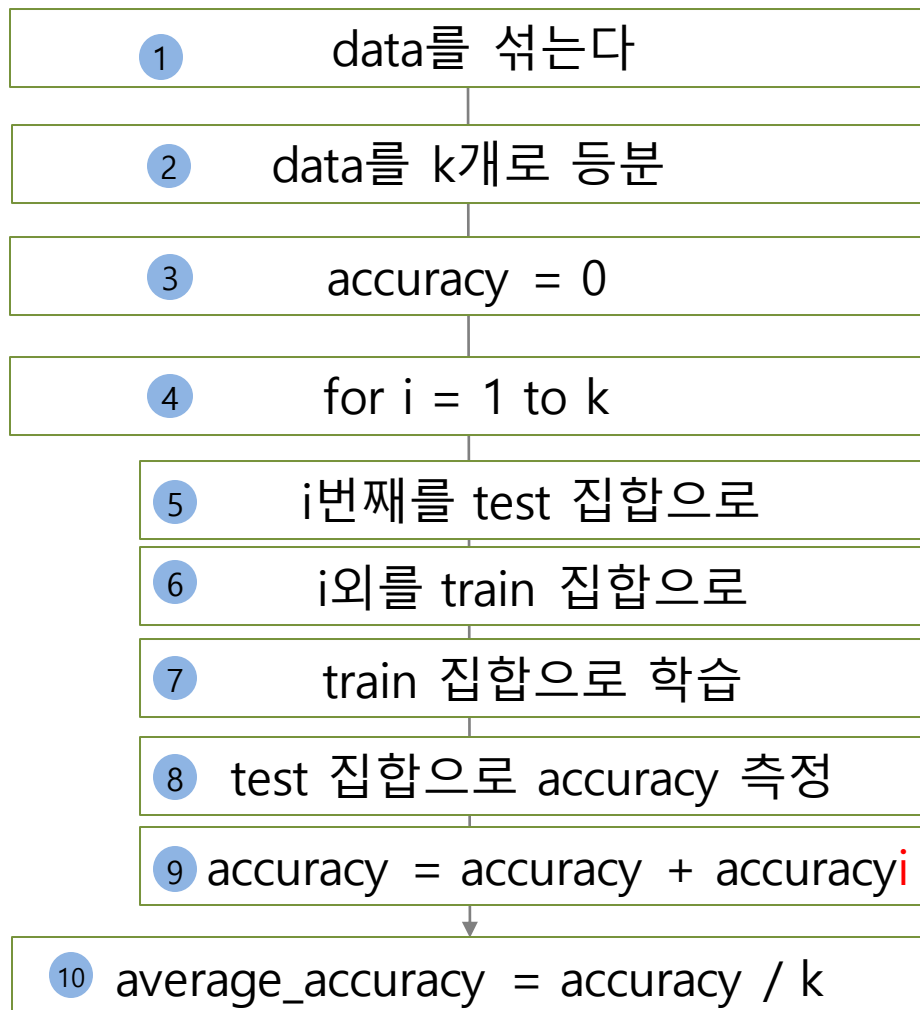


train data
test data



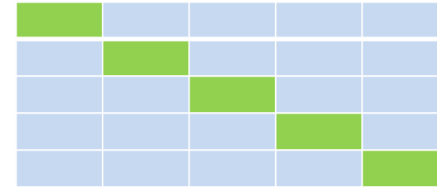
10.4 교차 검증

■ k -겹 교차 검증을 알고리즘



■ k-겹 교차 검증을 알고리즘 : for 문을 이용한 코드

```
14 # k-겹 교차 검증 #
15 library(caret)
16 data = iris[sample(nrow(iris)), ] # iris data 순서 섞음.
17 head(data)
18 k = 5
19 q = nrow(data)/k # k개 등분시 부분집합 크기
20 q
```



train data
test data

Console

Jobs x

C:/RSources/ ↗

```
> data = iris[sample(nrow(iris)), ] # iris data 순서 섞음.
> head(data)
   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
7             4.6         3.4          1.4          0.3   setosa
32            5.4         3.4          1.5          0.4   setosa
98            6.2         2.9          4.3          1.3 versicolor
133           6.4         2.8          5.6          2.2  virginica
132           7.9         3.8          6.4          2.0  virginica
11            5.4         3.7          1.5          0.2   setosa

> data = iris[sample(nrow(iris)), ] # iris data 순서 섞음.
> head(data)
   Sepal.Length Sepal.Width Petal.Length Petal.Width Species
18            5.1         3.5          1.4          0.3   setosa
81            5.5         2.4          3.8          1.1 versicolor
146           6.7         3.0          5.2          2.3  virginica
129           6.4         2.8          5.6          2.1  virginica
34            5.5         4.2          1.4          0.2   setosa
105           6.5         3.0          5.8          2.2  virginica

> k = 5
> q = nrow(data)/k # k개 등분시 부분집합 크기
> q
[1] 30
```



■ k -겹 교차 검증을 알고리즘 : for 문을 이용한 코드

Console

Jobs x

C:/RSources/ ↗

```
> data = iris[sample(nrow(iris)), ]      # iris data 순서 섞음.
> k = 5
> q = nrow(data)/k                      # k개 등분시 부분집합 크기
> l = 1:nrow(data)
> accuracy = 0
> for(i in 1:k) {
+   test_list = ((i-1)*q+1):(i*q)        # i번째를 test집합으로 설정
+   testData = data[test_list, ]
+   train_list = setdiff(l, test_list)   # i번째를 제외하고 train 집합으로 설정
+   trainData = data[train_list, ]
+   f = train(Species~., data = trainData, method = 'rf') #모델학습(randomforest)
+   p = predict(f, newdata = testData)
+   t = table(p, testData$Species)
+   accuracy=accuracy+(t[1, 1]+t[2, 2]+t[3, 3])/length(test_list) # 정확률&누적
+ }
> (average_accuracy = accuracy/k)        # 평균 정확률
[1] 0.9533333
```

[1] 0.9466667

[1] 0.94

[1] 0.9533333

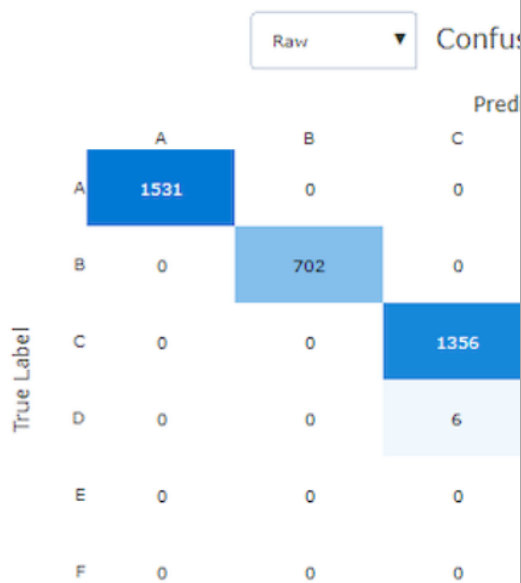


10.4 교차 검증

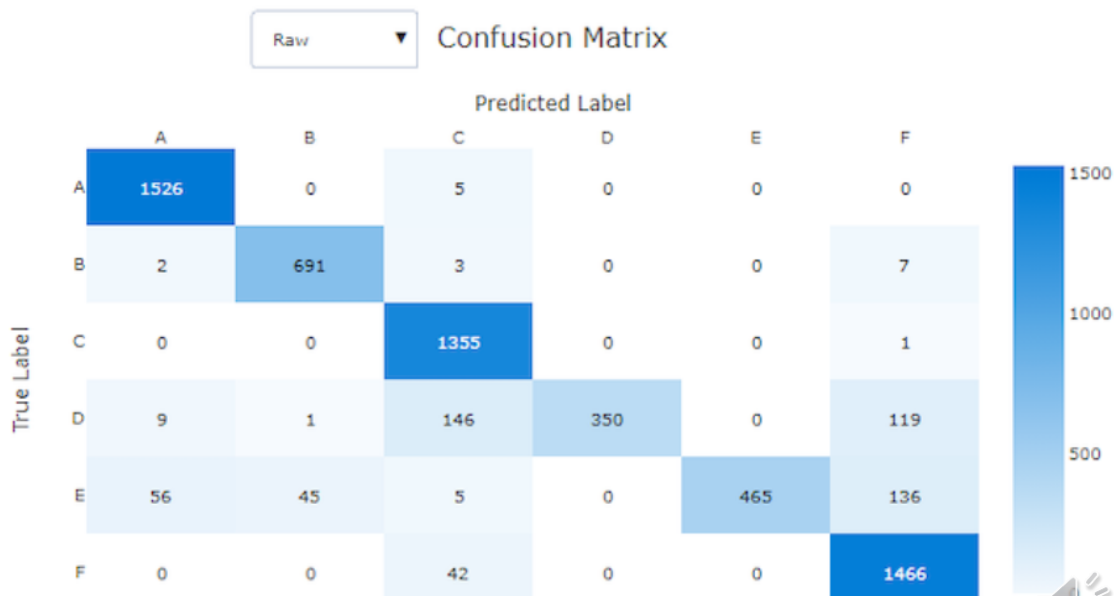
- k -겹 교차 검증을 알고리즘 : for 문을 이용한 코드

> accuracy=accuracy+(t[1, 1]+t[2, 2]+t[3, 3])/length(test_list) # 정확률&누적

좋은 모델의 혼동 행렬



나쁜 모델의 혼동 행렬



■ caret 라이브러리를 이용한 코드

```
Console C:/RSources/
> #
> # caret 라이브러리로 정확률 교차 검증
> f <- trainControl(method = 'cv', number = 5)
> f = train(Species~., data = iris, method = 'rf', metric = 'Accuracy',
>   trControl = control)
> confusionMatrix(f)
Cross-Validated (5 fold) Confusion Matrix
(entries are percentual average cell counts across resamples)

Prediction Reference
Prediction setosa versicolor virginica
setosa 33.3 0.0 0.0
versicolor 0.0 31.3 2.7
virginica 0.0 2.0 30.7

Accuracy (average) : 0.9533
```

5-겹 교차 검증



Thank you

