# KANG MINSU

Data Enthusiast

Master of Science
Dept. Statistics and Actuarial Science
Soongsil University

Phone : 010-3103-7944
E-Mail : kms950216@gmail.com

# INTRODUCTION

## Profile

**강민수** KANG MINSU
1995.02.16
서울특별시 금천구 금하로 816

숭실대학교 일반대학원 정보통계보험수리학과 **이학석사**
(2019.09 - 2021.08)
숭실대학교 자연과학대학 정보통계보험수리학과 **학사**
(2013.03 - 2019.08)

### Research Interest

Predictive Modeling, Big Data Analytics, Data Visualization

0

# CONTENTS

PCA, Clustering, Prediction, Visualization

# Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

## Purpose

- 개발된 비색센서 어레이의 **소화기암 관련 VOC 검출 가능 여부 검증**
- 주어진 자료를 통해 **예측 모형 구축**
- 분석 결과와 새로운 자료에 대한 분석 및 예측 결과 **시각화 툴 개발**

## Methodology

- PCA 후 k-means, **계층적 군집분석**
- LDA, Logistic Regression, SVM, XGBoost 모형 이용
- R Shiny 이용한 시각화 웹페이지 개발 후 Docker로 배포

## Data

- 총 90개의 VOC를 어레이에 각각 5번 반복하여 노출시켰을 때, 어레이의 35개 spot의 색 변화 데이터
- **VOC 종류(1-90), spot 번호(1-35), 색(R,G,B), 반복 회차(1-5)**

$r_{ijk}, g_{ijk}, b_{ijk}$

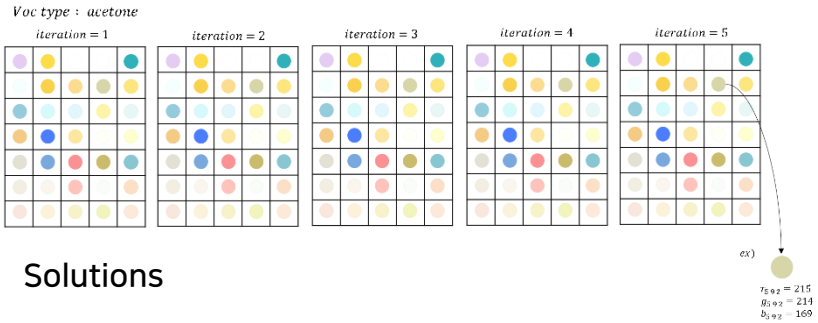
$i = 1,2 \ldots, 5\ (number\ of\ iteration)$

$j = 1,2 \ldots, 35\ (number\ of\ spot)$

$k = 1,2 \ldots, 90\ (VOC\ type)$

## Environment

```
R 3.6.1
shiny; shinydashboard; shinymanager; plotly; dendextend
RColorBrewer; MASS; xgboost; e1071
```




## Issues

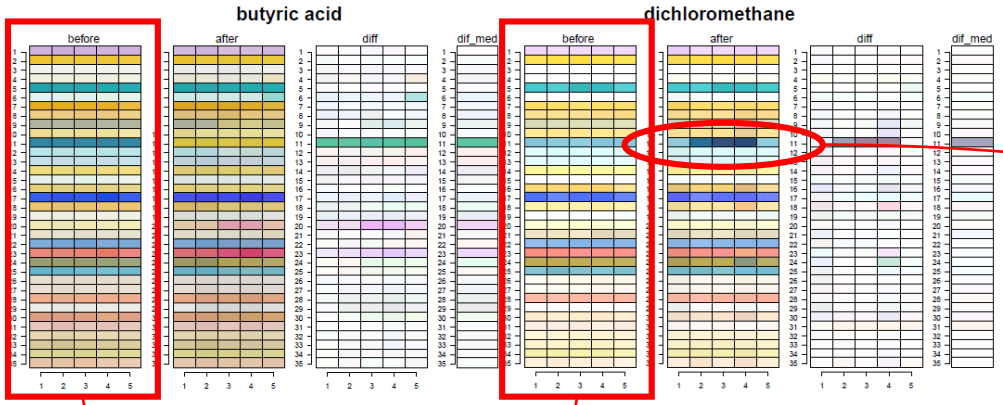
1) VOC 노출과 무관한 **체계적인 편향**에 의한 RGB 값의 변화 관측 (특정 spot에서 큰 변동 관측, 밝기의 정도가 동일하지 않음)
2) 원 데이터는 **실제 환자의 날숨이 아닌** VOC를 각각 노출 시켰을 때의 데이터
3) 예측 모형의 목적에 따라 성능 평가 지표의 중요도 차이 존재

## Solutions

1) 문제가 있는 spot의 이미지를 읽어와 전체 spot에서의 RGB 값의 평균값으로 보정(**품질 관리**), 밝기를 보정한 RGB 값으로 변환(**RGB 정규화**)
2) 암 환자와 일반인의 호기가스에서 나오는 **VOC의 상대 비율을 이용해** 암 환자와 일반인 데이터 생성
3) 진단의 목적인 경우, 양성, 음성이라고 예측한 사람들 중 실제로 양성, 음성인 사람의 비율이 중요하다고 판단(**PPV, NPV**)

# Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

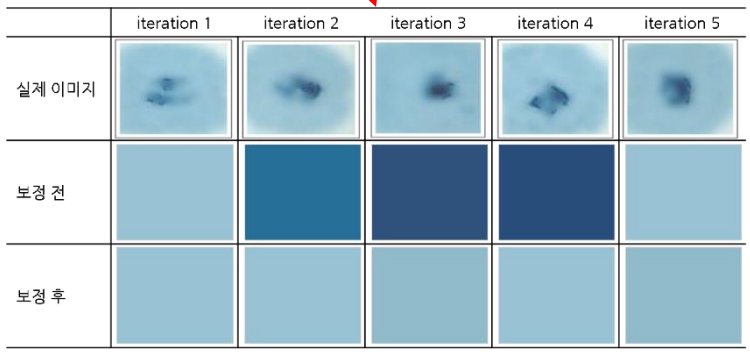
## 1) 소화기암 관련 VOC 검출 가능 여부 검증

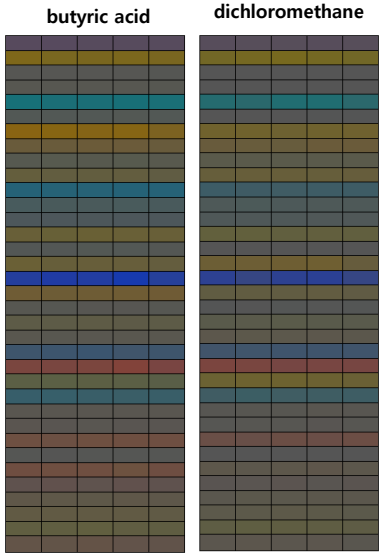



$X$ 축 : $number\ of\ iteration\ (i = 1,2\ldots,5)$
$before$ : 5번의 반복실험에서의 노출 전
$after$ : 5번의 반복실험에서의 노출 후

$Y$축 : $number\ of\ spot\ (j = 1,2,\ldots,35)$
$diff$ : 5번의 반복실험에서의 노출 전/ 후의 차이
$dif\_med$ : 5번의 반복실험에서의 노출 전/ 후 중앙값의 차이

반복 관측치 마다 변동이 큰 spot 보정



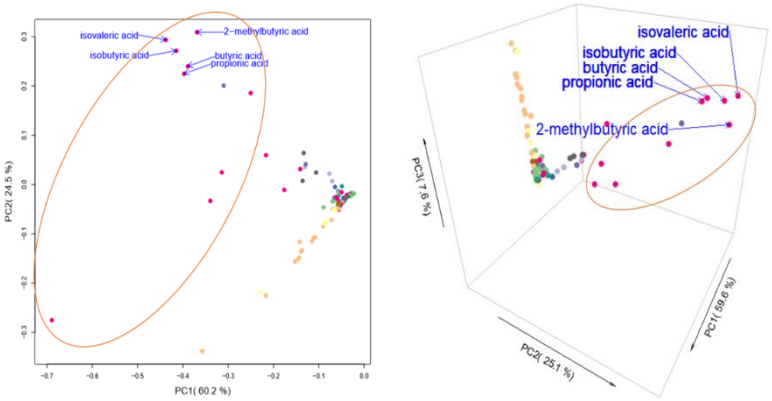




밝기를 보정하기 위해 RGB 정규화

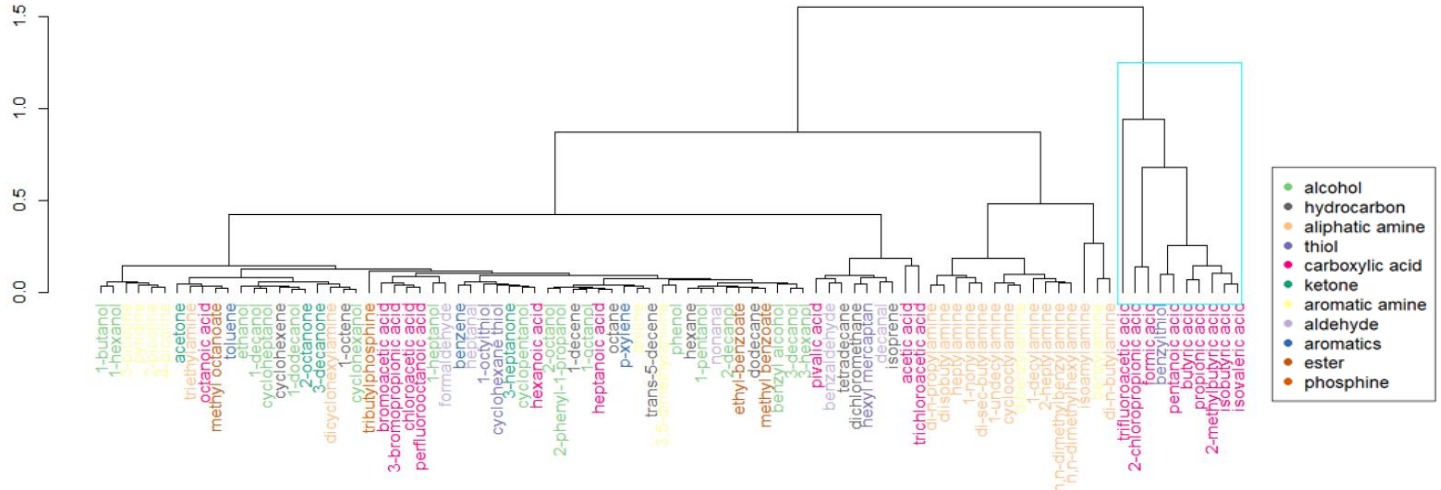
$$\left(\mathbf{r}' = \frac{\mathbf{r}}{\mathbf{r+g+b}},\ \mathbf{g}' = \frac{\mathbf{g}}{\mathbf{r+g+b}},\ \mathbf{b}' = \frac{\mathbf{b}}{\mathbf{r+g+b}}\right)$$

## Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

# 1) 소화기암 관련 VOC 검출 가능 여부 검증




주성분 분석 후 2개의 주성분과 3개의 주성분을 사용했을 때의 산점도




세개의 주성분을 이용하여 계층적 군집분석을 수행한 결과

소화기 암과 관련된 VOC가 하나의 군집으로 묶이는 것을 볼 수 있다.

PCA, Clustering, Prediction, Visualization

## Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

# 2) 임의 데이터 생성 후 모델링

① 자료 생성

$r^*_{jk} = \tilde{r}_{.jk} + normal\ (0\ ,\ \hat{\sigma}_{r\ jk\ c}\ )$

$g^*_{jk} = \tilde{g}_{.jk} + normal\ (0\ ,\ \hat{\sigma}_{g\ jk\ c})$

$b^*_{jk} = \tilde{b}_{.jk} + normal\ (0\ ,\ \hat{\sigma}_{b\ jk\ c})$

$j = 1, \dots, 35\ (number\ of\ spot\ ),\ k = 1, \dots, 10\ (voc\ type)\ ,\ c = 1,2,3\ (cluster)$

$normal\ (\mu, \sigma)$ : 평균이 $\mu$, 표준편차가 $\sigma$ 인 정규분포에서 난수 생성

② 호기 가스 상대 비율과 선형 결합

암환자와 일반인을 구분하기 위해 사람의 호기 가스에서 나오는 VOC별 선형 결합

$\underline{w_n} = (w_{1n}, w_{2n}, \dots, w_{10n})'$ : 일반인의 호기 가스 상대 비율 $n =$ 일반인

$\underline{w_c} = (w_{1c}, w_{2c}, \dots, w_{10c})'$ : 암환자의 호기 가스 상대 비율 $c =$ 암환자

| voc.name | $w_n$ | $w_c$ |
|---|---|---|
| Isoprene | 0.7414 | 0.7414 |
| Acetone | 1 | 1 |
| Dichloromethane | 0.0138 | 0.0138 |
| ocatane | 0.069 | 0.069 |
| Hexane | 0.069 | 0.069 |
| toluene | 0.0862 | 0.0862 |
| Propionic acid | 0.0017 | 0.4828 |
| Butyric acid | 0 | 0.0345 |
| Isovaleric acid | 0.0017 | 0.0016 |
| 2-Methylbutyric acid | 0 | 0.0138 |

$r^*_{j1} * w_{1n} + r^*_{j2} * w_{2n} + \cdots + r^*_{j10} * w_{10n} \equiv R_{jn}$

$r^*_{j1} * w_{1c} + r^*_{j2} * w_{2c} + \cdots + r^*_{j10} * w_{10c} \equiv R_{jc}$

③ Euclidian distance로 변경

$\underline{d_n} = (d_{1n}, d_{2n}, \dots, d_{35n})'$

$\underline{d_c} = (d_{1c}, d_{2c}, \dots, d_{35c})'$

$d_{jn} = \sqrt{{R_{jn}}^2 + {G_{jn}}^2 + {B_{jn}}^2}\ + normal\ (0\ , \xi\ )$

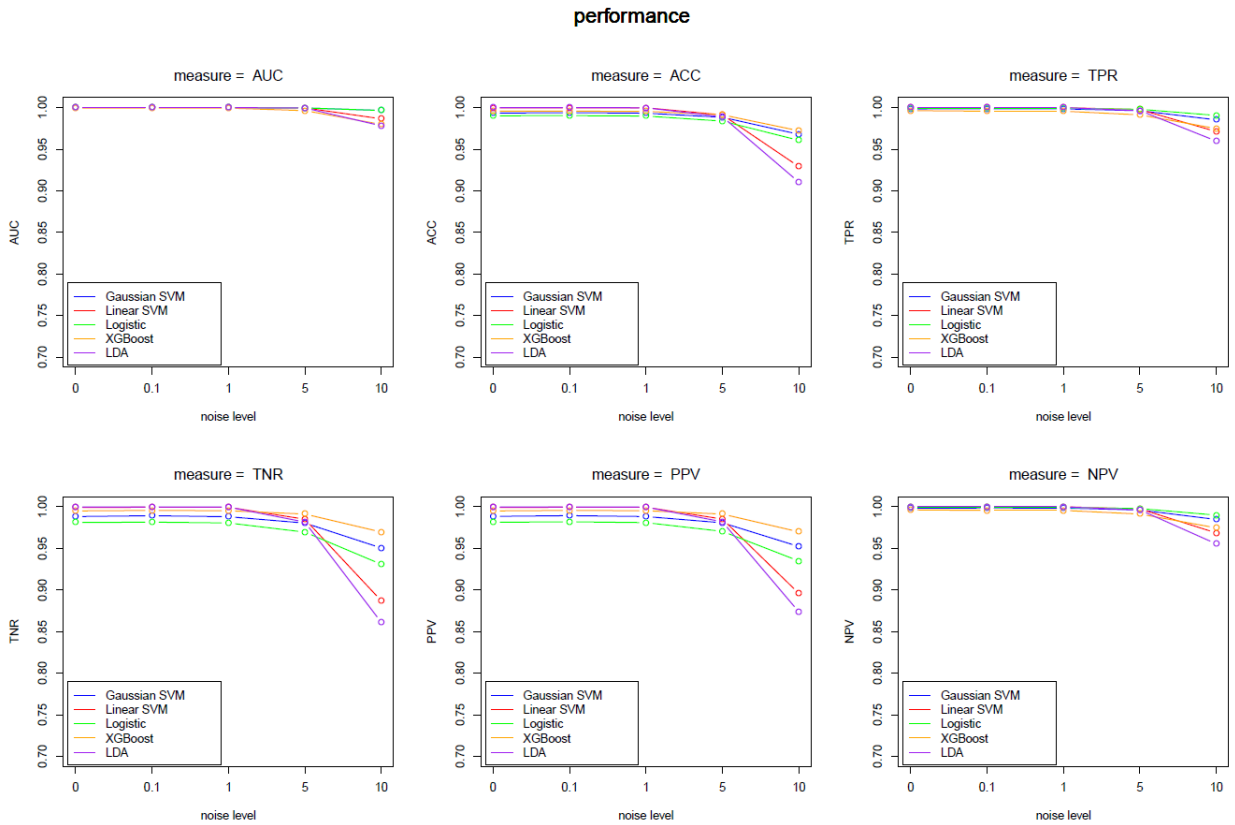
$d_{jc} = \sqrt{{R_{jc}}^2 + {G_{jc}}^2 + {B_{jc}}^2}\ + normal\ (0\ , \xi)$

$j = 1, \dots, 35\ (number\ of\ spot\ ),\ n =$ 일반인 , $c =$ 암환자

$\xi = noise\ \ level\ (0, 0.1, 1, 5, 10)$

# Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

## 2) 임의 데이터 생성 후 모델링



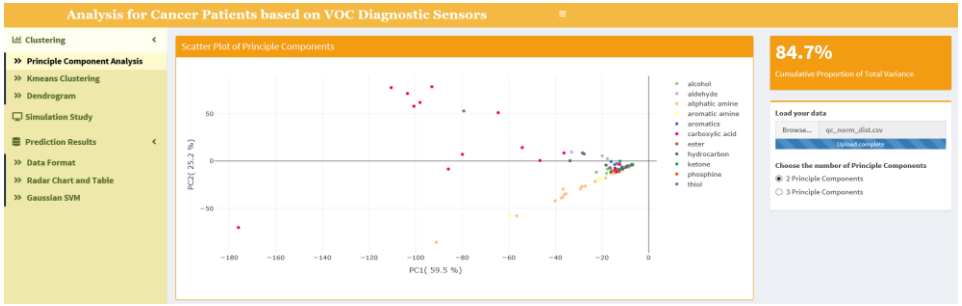

**모델링 결과**

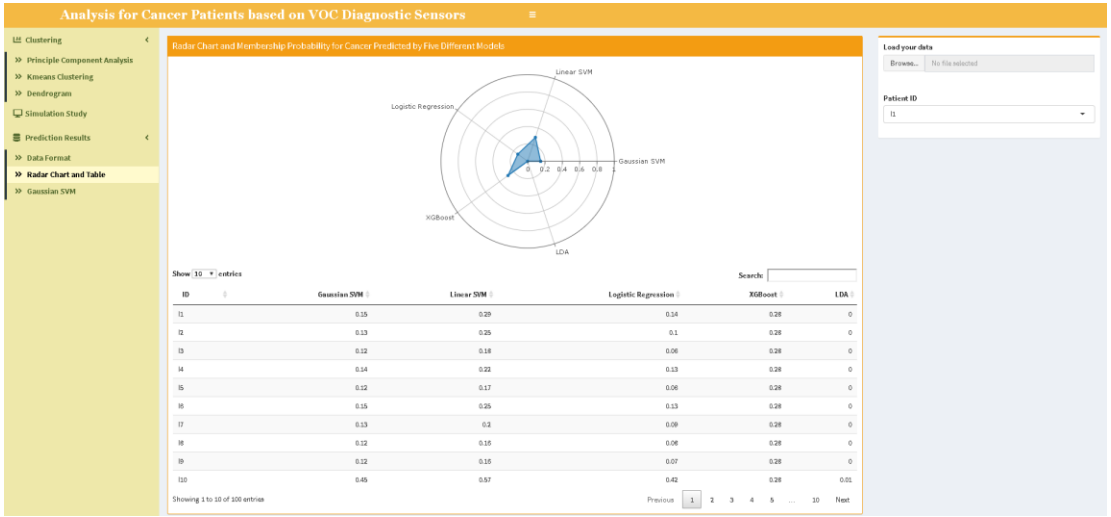
임의로 생성한 자료를 사용했기 때문에 전반적으로 모든 모형이 좋은 성능을 보였다.

PCA, Clustering, Prediction, Visualization

# Validity Evaluation and Modeling for Colorimetric Sensor Array

## 3) 시각화 툴 개발




**시각화 툴 화면**

연구 결과를 포함하여, 새로운 실험 자료를 업로드하면 해당 자료에 대해주성분 분석, 군집분석을 수행한 결과를 볼 수 있게 구현하였고, 환자의 호기가스를 어레이에 노출시킨 결과를 업로드하면 앞서 구축한 모델로 소화기암 여부를 판단한 결과를 확인할 수 있다.

NRI, IDI, cNRI, dAUC, Bootstrap Confidence Intervals, Type I Error, Power

# Comparison of Evaluation Index for improving model performance using Bootstrap Confidence Intervals

## Purpose

- NRI, IDI, cNRI, dAUC 지표 타당성 비교
- 각 지표에 대한 구간 추정 결과,
  1) 실제로 모형 성능 향상이 없을 때 있다고 판단할 확률**(1종 오류)이 통제되는지**
  2) 모형 성능 향상이 명백해 짐에 따라 **얼마나 빠르게 성능 향상이 있다고 판단하는지**
  3) 위 두가지를 판단하기 위해 추정한 **신뢰 구간의 포함 확률이 적절한지**

  **다양한 상황의 모의실험**을 통해 비교

## Methodology

- 특정 질병과 관련된 예후 인자를 식별하기 위한 지표로 NRI, IDI, cNRI, dAUC 존재 (Pencina et al. 2011)
- **정규성 가정 하에서** 가설 검정 시, 귀무가설 하에서 정규성 가정이 위배돼 **제1종 오류가 너무 크거나 검정력이 매우 작은 상황 발생**

  → **Bootstrap 신뢰구간** 사용하여 해결 (Shao et al. 2015, Olga et al. 2017)
- **포함비율(coverage probability)**와 **검정력 함수(power function)**

  포함비율 $= P(\{CI_{lower} \le \text{모수값} \le CI_{upper}\})$

  검정력 함수 $= 1 - P(\{CI_{lower} \le 0 \le CI_{upper}\})$

## Definition

### 1) 지표 정의

$M_1$: 기존 모형

$M_2$: 새로운 바이오 마커 추가한 모형

$D = \{0,1\}$: 질병의 여부를 나타내는 이진 변수

$\mathbf{NRI} = [P(up|D=1) - P(down|D=1)] + [P(down|D=0) - P(up|D=0)]$

$\mathbf{c.NRI} = E\{sign(P(M_2) - P(M_1))|D=1\} - E\{sign(P(M_2) - P(M_1))|D=0\}$

$\mathbf{IDI} = E\{P(M_2) - P(M_1)|D=1\} - E\{P(M_2) - P(M_1)|D=0\}$

$\Delta\mathbf{AUC} = AUC(M_2) - AUC(M_1)$

### 2) 신뢰구간

Asymptotic - 점근적 정규성 근사를 적용한 신뢰구간

$$\hat{\theta} - z_{\frac{\alpha}{2}}\widehat{se}(\hat{\theta}) < \theta_0 < \hat{\theta} + z_{\frac{\alpha}{2}}\widehat{se}(\hat{\theta})$$

Boot I - Asymptotic 신뢰구간에서 $\widehat{se}(\hat{\theta})$을 붓스트랩 표준오차로 대체한 신뢰구간

$$\hat{\theta} - z_{\frac{\alpha}{2}}\widehat{se}^*(\hat{\theta}) < \theta_0 < \hat{\theta} + z_{\frac{\alpha}{2}}\widehat{se}^*(\hat{\theta})$$

Boot II - $\tau = |\hat{\theta} - \theta_0|$의 붓스트랩 버전인 $\tilde{\tau} = |\tilde{\theta} - \hat{\theta}|$을 사용한 신뢰구간

$$\hat{\theta} - Q_{\tilde{\tau}}(1-\alpha) < \theta_0 < \hat{\theta} + Q_{\tilde{\tau}}(1-\alpha)$$

## Comparison of Evaluation Index for improving model performance using Bootstrap Confidence Intervals

# 1) Simulation

### Scenario I

- True Model : $\log\frac{p}{1-p} = 1 - 2X_1 + 3kX_2$

  $X_i \sim N(1,2^2)$ , $i = 1,2$

  $k = \{0,0.01,0.05,0.1,0.2,0.3,0.4,0.6,0.8,1\}$

- $M_1: \log\frac{p}{1-p} = \alpha_0 + \alpha_1 X_1$

  $M_2: \log\frac{p}{1-p} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2$

- 단순한 두 모형 비교

### Scenario II

- True Model : $\log\frac{p}{1-p} = -3 + 0.02X_1 + 0.9X_2 + 0.01X_3 + 0.01X_4 - 0.01X_5 + 0.2X_6 + 1.5kX_7$

  $X_1 \sim N(40,12^2)$, $X_i \sim Ber(0.5), i = 2,6$, $X_3 \sim Unif(120,320)$, $X_4 \sim N(110,1^2)$

  $X_5 \sim Unif(30,70)$, $X_7 \sim N(1,2^2)$

  $k = \{0,0.01,0.05,0.1,0.2,0.3,0.4,0.6,0.8,1\}$

- $M_1: \log\frac{p}{1-p} = \alpha_0 + \alpha_1 X_1 + \alpha_2 X_2 + \alpha_3 X_3 + \alpha_4 X_4 + \alpha_5 X_5 + \alpha_6 X_6$

  $M_2: \log\frac{p}{1-p} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + \beta_6 X_6 + \beta_7 X_7$

- 각 설명 변수는 나이, 성별, 총 콜레스테롤, SBP, HDL, 흡연여부와 같은 범위를 갖음.

  → **현실에 대응하는 모형**

### Scenario III

- True Model : $\log\frac{p}{1-p} = 1 + 0.5X_1 - 2kX_2 + 1.5kX_3 + 3kX_4 - 2.7kX_5 - kX_6$

  $X_i \sim N(1,2^2)$ , $i = 1,2,3,4,5,6$

  $k = \{0,0.01,0.05,0.1,0.2,0.3,0.4,0.6,0.8,1\}$

- $M_1: \log\frac{p}{1-p} = \alpha_0 + \alpha_1 X_1$

  $M_2: \log\frac{p}{1-p} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_5 X_5 + \beta_6 X_6$

- $k = 0$일 때, $M_2$가 매우 **과적합되는** 양상을 보일 것이며,

  $k \neq 0$에서는, $M_1$이 $M_2$에 비해 훨씬 안좋은 모형이 될 것임

### Scenario IV

- True Model : $\log\frac{p}{1-p} = 1 + 2X_1 - 0.9kX^{2k+1}$

  $X_i \sim Unif(0,2)$ , $k = \{0,0.01,0.05,0.1,0.2,0.3,0.4,0.6,0.8,1\}$

- $M_1: \log\frac{p}{1-p} = \alpha_0 + \alpha_1 X_1$

  $M_2: \log\frac{p}{1-p} = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2^{2k+1}$

- 두 모형이 **동일한 설명변수를 사용하지만,**

  **모형에 차이가 있는 경우**

NRI, IDI, cNRI, dAUC, Bootstrap Confidence Intervals, Type I Error, Power

## Comparison of Evaluation Index for improving model performance using Bootstrap Confidence Intervals

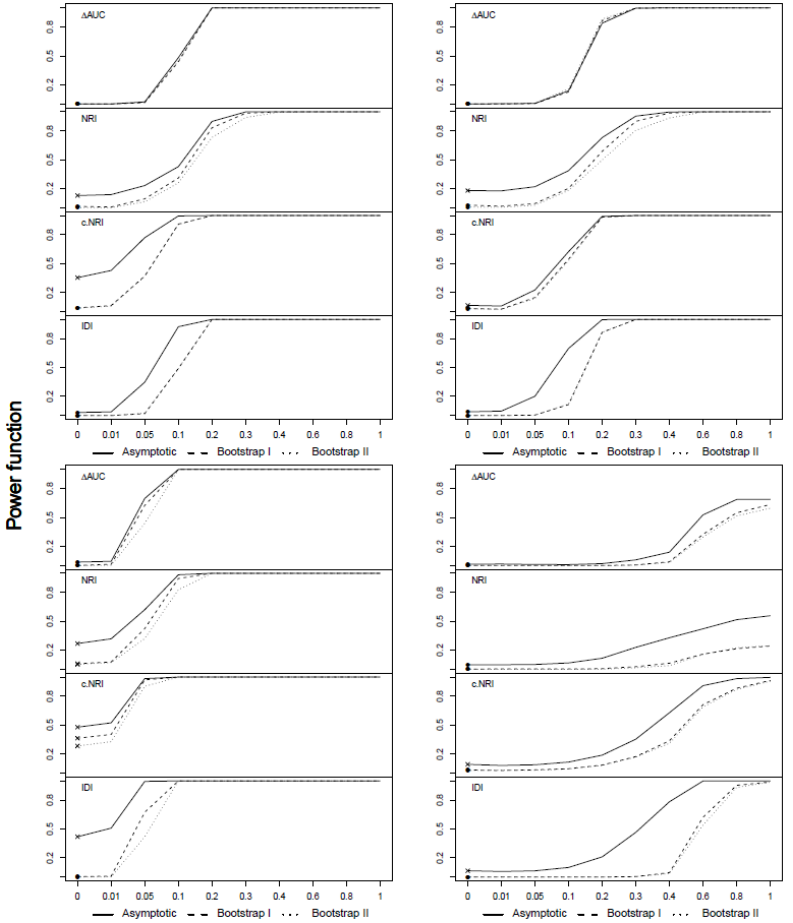
# 2) Results

| k | n | dAUC TRUE | dAUC Asymptotic CP | dAUC Asymptotic P | dAUC I CP | dAUC I P | dAUC II CP | dAUC II P | NRI TRUE | NRI Asymptotic CP | NRI Asymptotic P | NRI I CP | NRI I P | NRI II CP | NRI II P | cNRI TRUE | cNRI Asymptotic CP | cNRI Asymptotic P | cNRI I CP | cNRI I P | cNRI II CP | cNRI II P | IDI TRUE | IDI Asymptotic CP | IDI Asymptotic P | IDI I CP | IDI I P | IDI II CP | IDI II P |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 500 | 0.0000 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0.0000 | 0.872 | 0.128 | 0.984 | 0.016 | 0.996 | 0.004 | 0.0000 | 0.646 | 0.354 | 0.96 | 0.04 | 0.963 | 0.037 | 0.0000 | 0.968 | 0.032 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.01 | 500 | 0.0001 | 0.993 | 0.001 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0.0007 | 0.789 | 0.138 | 0.995 | 0.009 | 0.999 | 0.002 | 0.0644 | 0.683 | 0.429 | 0.972 | 0.064 | 0.975 | 0.058 | 0.0002 | 0.913 | 0.038 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.05 | 500 | 0.0015 | 0.885 | 0.022 | 0.951 | 0.015 | 0.98 | 0.018 | 0.0050 | 0.865 | 0.232 | 0.96 | 0.094 | 0.969 | 0.063 | 0.3119 | 0.669 | 0.77 | 0.936 | 0.371 | 0.966 | 0.367 | 0.0056 | 0.75 | 0.347 | 0.922 | 0.02 | 0.975 | 0.024 |
| 0.1 | 500 | 0.0060 | 0.929 | 0.482 | 0.941 | 0.44 | 0.948 | 0.448 | 0.0177 | 0.889 | 0.429 | 0.938 | 0.31 | 0.947 | 0.26 | 0.5811 | 0.699 | 0.996 | 0.954 | 0.911 | 0.958 | 0.908 | 0.0217 | 0.751 | 0.924 | 0.931 | 0.49 | 0.943 | 0.489 |
| 0.2 | 500 | 0.0227 | 0.945 | 1 | 0.945 | 1 | 0.944 | 1 | 0.0619 | 0.9 | 0.899 | 0.938 | 0.833 | 0.945 | 0.733 | 0.9513 | 0.786 | 1 | 0.943 | 1 | 0.946 | 1 | 0.0781 | 0.765 | 1 | 0.946 | 1 | 0.946 | 1 |
| 0.3 | 500 | 0.0473 | 0.946 | 1 | 0.948 | 1 | 0.947 | 1 | 0.1203 | 0.922 | 0.998 | 0.948 | 0.984 | 0.96 | 0.94 | 1.1685 | 0.872 | 1 | 0.959 | 1 | 0.962 | 1 | 0.1536 | 0.777 | 1 | 0.952 | 1 | 0.948 | 1 |
| 0.4 | 500 | 0.0762 | 0.941 | 1 | 0.942 | 1 | 0.938 | 1 | 0.1836 | 0.905 | 1 | 0.936 | 1 | 0.945 | 0.995 | 1.3064 | 0.863 | 1 | 0.943 | 1 | 0.946 | 1 | 0.2346 | 0.768 | 1 | 0.951 | 1 | 0.951 | 1 |
| 0.6 | 500 | 0.1356 | 0.957 | 1 | 0.958 | 1 | 0.957 | 1 | 0.3045 | 0.905 | 1 | 0.956 | 1 | 0.965 | 1 | 1.4792 | 0.92 | 1 | 0.959 | 1 | 0.962 | 1 | 0.3862 | 0.747 | 1 | 0.946 | 1 | 0.948 | 1 |
| 0.8 | 500 | 0.1884 | 0.952 | 1 | 0.95 | 1 | 0.949 | 1 | 0.4071 | 0.842 | 1 | 0.946 | 1 | 0.955 | 1 | 1.5861 | 0.923 | 1 | 0.956 | 1 | 0.959 | 1 | 0.5076 | 0.742 | 1 | 0.952 | 1 | 0.953 | 1 |
| 1 | 500 | 0.2313 | 0.958 | 1 | 0.958 | 1 | 0.959 | 1 | 0.4887 | 0.815 | 1 | 0.953 | 1 | 0.964 | 1 | 1.6593 | 0.923 | 1 | 0.944 | 1 | 0.946 | 1 | 0.5986 | 0.767 | 1 | 0.951 | 1 | 0.948 | 1 |

| k | n | dAUC TRUE | dAUC Asymptotic CP | dAUC Asymptotic P | dAUC I CP | dAUC I P | dAUC II CP | dAUC II P | NRI TRUE | NRI Asymptotic CP | NRI Asymptotic P | NRI I CP | NRI I P | NRI II CP | NRI II P | cNRI TRUE | cNRI Asymptotic CP | cNRI Asymptotic P | cNRI I CP | cNRI I P | cNRI II CP | cNRI II P | IDI TRUE | IDI Asymptotic CP | IDI Asymptotic P | IDI I CP | IDI I P | IDI II CP | IDI II P |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 500 | 0.0000 | 0.999 | 0.001 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0.0000 | 0.82 | 0.18 | 0.972 | 0.028 | 0.993 | 0.007 | 0.0000 | 0.934 | 0.066 | 0.967 | 0.033 | 0.969 | 0.031 | 0.0000 | 0.961 | 0.039 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 |
| 0.01 | 500 | 0.0001 | 0.994 | 0.003 | 1 | 0 | 0.998 | 0.002 | 0.0011 | 0.818 | 0.177 | 0.984 | 0.018 | 0.994 | 0.007 | 0.0237 | 0.969 | 0.059 | 0.981 | 0.027 | 0.982 | 0.025 | 0.0002 | 0.937 | 0.046 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.05 | 500 | 0.0035 | 0.859 | 0.006 | 0.998 | 0.006 | 0.997 | 0.01 | 0.0066 | 0.866 | 0.22 | 0.972 | 0.045 | 0.986 | 0.028 | 0.1202 | 0.971 | 0.226 | 0.986 | 0.148 | 0.99 | 0.137 | 0.0038 | 0.697 | 0.201 | 0.997 | 0.005 | 0.998 | 0.005 |
| 0.1 | 500 | 0.0137 | 0.899 | 0.138 | 0.912 | 0.126 | 0.936 | 0.158 | 0.0220 | 0.847 | 0.387 | 0.949 | 0.203 | 0.969 | 0.182 | 0.2376 | 0.921 | 0.625 | 0.935 | 0.546 | 0.957 | 0.531 | 0.0149 | 0.709 | 0.698 | 0.925 | 0.114 | 0.943 | 0.121 |
| 0.2 | 500 | 0.0486 | 0.922 | 0.841 | 0.918 | 0.867 | 0.918 | 0.884 | 0.0753 | 0.9 | 0.731 | 0.945 | 0.588 | 0.963 | 0.498 | 0.4600 | 0.946 | 0.992 | 0.967 | 0.985 | 0.969 | 0.983 | 0.0544 | 0.735 | 0.998 | 0.94 | 0.866 | 0.943 | 0.866 |
| 0.3 | 500 | 0.0936 | 0.926 | 0.997 | 0.914 | 0.998 | 0.912 | 0.998 | 0.1458 | 0.898 | 0.954 | 0.948 | 0.9 | 0.968 | 0.806 | 0.6561 | 0.932 | 1 | 0.946 | 1 | 0.957 | 1 | 0.1097 | 0.731 | 1 | 0.94 | 0.999 | 0.94 | 0.999 |
| 0.4 | 500 | 0.1398 | 0.919 | 1 | 0.916 | 1 | 0.914 | 1 | 0.2206 | 0.909 | 0.997 | 0.958 | 0.986 | 0.982 | 0.935 | 0.8248 | 0.94 | 1 | 0.959 | 1 | 0.963 | 1 | 0.1728 | 0.754 | 1 | 0.942 | 1 | 0.94 | 1 |
| 0.6 | 500 | 0.2200 | 0.93 | 1 | 0.922 | 1 | 0.926 | 1 | 0.3573 | 0.885 | 1 | 0.964 | 1 | 0.983 | 0.997 | 1.0824 | 0.937 | 1 | 0.955 | 1 | 0.957 | 1 | 0.2993 | 0.789 | 1 | 0.947 | 1 | 0.946 | 1 |
| 0.8 | 500 | 0.2796 | 0.92 | 1 | 0.902 | 1 | 0.923 | 1 | 0.4656 | 0.855 | 1 | 0.952 | 1 | 0.982 | 1 | 1.2599 | 0.924 | 1 | 0.944 | 1 | 0.952 | 1 | 0.4081 | 0.777 | 1 | 0.941 | 1 | 0.939 | 1 |
| 1 | 500 | 0.3221 | 0.917 | 1 | 0.906 | 1 | 0.926 | 1 | 0.5478 | 0.837 | 1 | 0.959 | 1 | 0.985 | 1 | 1.3841 | 0.928 | 1 | 0.954 | 1 | 0.961 | 1 | 0.4949 | 0.821 | 1 | 0.955 | 1 | 0.952 | 1 |

| k | n | dAUC TRUE | dAUC Asymptotic CP | dAUC Asymptotic P | dAUC I CP | dAUC I P | dAUC II CP | dAUC II P | NRI TRUE | NRI Asymptotic CP | NRI Asymptotic P | NRI I CP | NRI I P | NRI II CP | NRI II P | cNRI TRUE | cNRI Asymptotic CP | cNRI Asymptotic P | cNRI I CP | cNRI I P | cNRI II CP | cNRI II P | IDI TRUE | IDI Asymptotic CP | IDI Asymptotic P | IDI I CP | IDI I P | IDI II CP | IDI II P |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 500 | 0.0000 | 0.964 | 0.036 | 0.999 | 0.001 | 1 | 0 | 0.0000 | 0.731 | 0.269 | 0.94 | 0.06 | 0.948 | 0.052 | 0.0000 | 0.521 | 0.479 | 0.636 | 0.364 | 0.716 | 0.284 | 0.0000 | 0.581 | 0.419 | 0.995 | 0.005 | 0.999 | 0.001 |
| 0.01 | 500 | 0.0012 | 0.972 | 0.044 | 0.993 | 0.013 | 0.999 | 0.003 | 0.0031 | 0.736 | 0.318 | 0.931 | 0.077 | 0.943 | 0.071 | 0.0796 | 0.762 | 0.524 | 0.846 | 0.403 | 0.869 | 0.328 | 0.0015 | 0.634 | 0.509 | 0.995 | 0.009 | 0.998 | 0.002 |
| 0.05 | 500 | 0.0268 | 0.952 | 0.698 | 0.964 | 0.626 | 0.983 | 0.439 | 0.0436 | 0.818 | 0.621 | 0.9 | 0.425 | 0.921 | 0.321 | 0.3797 | 0.914 | 0.984 | 0.953 | 0.971 | 0.96 | 0.904 | 0.0349 | 0.746 | 0.995 | 0.967 | 0.674 | 0.981 | 0.419 |
| 0.1 | 500 | 0.0879 | 0.963 | 0.999 | 0.967 | 0.999 | 0.969 | 0.999 | 0.1425 | 0.848 | 0.984 | 0.924 | 0.945 | 0.939 | 0.828 | 0.6967 | 0.935 | 1 | 0.962 | 1 | 0.969 | 1 | 0.1240 | 0.766 | 1 | 0.951 | 1 | 0.966 | 1 |
| 0.2 | 500 | 0.2114 | 0.944 | 1 | 0.947 | 1 | 0.943 | 1 | 0.3506 | 0.815 | 1 | 0.902 | 1 | 0.925 | 1 | 1.1091 | 0.934 | 1 | 0.957 | 1 | 0.963 | 1 | 0.3351 | 0.744 | 1 | 0.94 | 1 | 0.946 | 1 |
| 0.3 | 500 | 0.2938 | 0.962 | 1 | 0.967 | 1 | 0.97 | 1 | 0.4996 | 0.782 | 1 | 0.906 | 1 | 0.915 | 1 | 1.3373 | 0.923 | 1 | 0.949 | 1 | 0.957 | 1 | 0.4946 | 0.766 | 1 | 0.932 | 1 | 0.938 | 1 |
| 0.4 | 500 | 0.3449 | 0.949 | 1 | 0.959 | 1 | 0.963 | 1 | 0.5996 | 0.674 | 1 | 0.853 | 1 | 0.878 | 1 | 1.4764 | 0.92 | 1 | 0.945 | 1 | 0.95 | 1 | 0.6007 | 0.758 | 1 | 0.934 | 1 | 0.938 | 1 |
| 0.6 | 500 | 0.4001 | 0.951 | 1 | 0.945 | 1 | 0.945 | 1 | 0.7192 | 0.569 | 1 | 0.76 | 1 | 0.794 | 1 | 1.6351 | 0.917 | 1 | 0.94 | 1 | 0.948 | 1 | 0.7244 | 0.749 | 1 | 0.929 | 1 | 0.933 | 1 |
| 0.8 | 500 | 0.4279 | 0.945 | 1 | 0.922 | 1 | 0.939 | 1 | 0.7864 | 0.496 | 1 | 0.693 | 1 | 0.769 | 1 | 1.7214 | 0.916 | 1 | 0.947 | 1 | 0.952 | 1 | 0.7915 | 0.788 | 1 | 0.935 | 1 | 0.941 | 1 |
| 1 | 500 | 0.4442 | 0.931 | 1 | 0.884 | 1 | 0.967 | 1 | 0.8289 | 0.43 | 1 | 0.696 | 1 | 0.749 | 1 | 1.7752 | 0.924 | 1 | 0.954 | 1 | 0.954 | 1 | 0.8327 | 0.797 | 1 | 0.942 | 1 | 0.946 | 1 |

| k | n | dAUC TRUE | dAUC Asymptotic CP | dAUC Asymptotic P | dAUC I CP | dAUC I P | dAUC II CP | dAUC II P | NRI TRUE | NRI Asymptotic CP | NRI Asymptotic P | NRI I CP | NRI I P | NRI II CP | NRI II P | cNRI TRUE | cNRI Asymptotic CP | cNRI Asymptotic P | cNRI I CP | cNRI I P | cNRI II CP | cNRI II P | IDI TRUE | IDI Asymptotic CP | IDI Asymptotic P | IDI I CP | IDI I P | IDI II CP | IDI II P |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 500 | 0.0000 | 0.986 | 0.014 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0.0000 | 0.951 | 0.049 | 0.998 | 0.002 | 0.998 | 0.002 | 0.0000 | 0.908 | 0.092 | 0.966 | 0.034 | 0.971 | 0.029 | 0.0000 | 0.934 | 0.066 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.01 | 500 | 0.0000 | 0.379 | 0.016 | 0.998 | 0.002 | 0.999 | 0.002 | 0.0001 | 0.27 | 0.048 | 0.994 | 0.006 | 0.999 | 0.001 | 0.0119 | 0.937 | 0.081 | 0.972 | 0.028 | 0.974 | 0.031 | 0.0000 | 0.857 | 0.058 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.05 | 500 | 0.0001 | 0.354 | 0.011 | 0.999 | 0.001 | 0.999 | 0.001 | 0.0008 | 0.259 | 0.051 | 0.995 | 0.005 | 0.999 | 0.001 | 0.0298 | 0.936 | 0.088 | 0.976 | 0.035 | 0.979 | 0.03 | 0.0002 | 0.248 | 0.065 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.1 | 500 | 0.0003 | 0.371 | 0.01 | 0.999 | 0.001 | 1 | 0.001 | 0.0016 | 0.312 | 0.067 | 0.996 | 0.004 | 0.999 | 0.001 | 0.0624 | 0.945 | 0.116 | 0.977 | 0.047 | 0.984 | 0.045 | 0.0006 | 0.276 | 0.1 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.2 | 500 | 0.0012 | 0.505 | 0.02 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0.0039 | 0.44 | 0.116 | 0.993 | 0.008 | 0.999 | 0.002 | 0.1215 | 0.935 | 0.188 | 0.989 | 0.085 | 0.996 | 0.081 | 0.0027 | 0.368 | 0.21 | 1 | 0 | 1 | 0 |
| 0.3 | 500 | 0.0031 | 0.679 | 0.059 | 0.999 | 0.006 | 0.999 | 0.005 | 0.0064 | 0.629 | 0.229 | 0.984 | 0.028 | 0.994 | 0.017 | 0.1773 | 0.9 | 0.354 | 0.974 | 0.173 | 0.987 | 0.168 | 0.0069 | 0.477 | 0.465 | 0.994 | 0.005 | 0.996 | 0.005 |
| 0.4 | 500 | 0.0058 | 0.819 | 0.139 | 0.969 | 0.039 | 0.987 | 0.034 | 0.0086 | 0.734 | 0.329 | 0.976 | 0.064 | 0.98 | 0.039 | 0.2348 | 0.861 | 0.629 | 0.961 | 0.337 | 0.982 | 0.311 | 0.0141 | 0.587 | 0.783 | 0.939 | 0.046 | 0.984 | 0.037 |
| 0.6 | 500 | 0.0113 | 0.919 | 0.527 | 0.96 | 0.325 | 0.971 | 0.297 | 0.0124 | 0.783 | 0.422 | 0.944 | 0.159 | 0.957 | 0.156 | 0.3477 | 0.784 | 0.911 | 0.952 | 0.713 | 0.959 | 0.688 | 0.0365 | 0.674 | 0.999 | 0.946 | 0.622 | 0.961 | 0.54 |
| 0.8 | 500 | 0.0133 | 0.929 | 0.687 | 0.947 | 0.549 | 0.959 | 0.516 | 0.0197 | 0.811 | 0.517 | 0.949 | 0.215 | 0.967 | 0.225 | 0.4596 | 0.74 | 0.984 | 0.952 | 0.884 | 0.963 | 0.872 | 0.0530 | 0.687 | 1 | 0.941 | 0.954 | 0.946 | 0.932 |
| 1 | 500 | 0.0136 | 0.935 | 0.689 | 0.946 | 0.634 | 0.958 | 0.596 | 0.0239 | 0.81 | 0.558 | 0.959 | 0.243 | 0.986 | 0.246 | 0.5586 | 0.725 | 0.997 | 0.951 | 0.965 | 0.956 | 0.956 | 0.0604 | 0.666 | 1 | 0.944 | 0.989 | 0.946 | 0.987 |



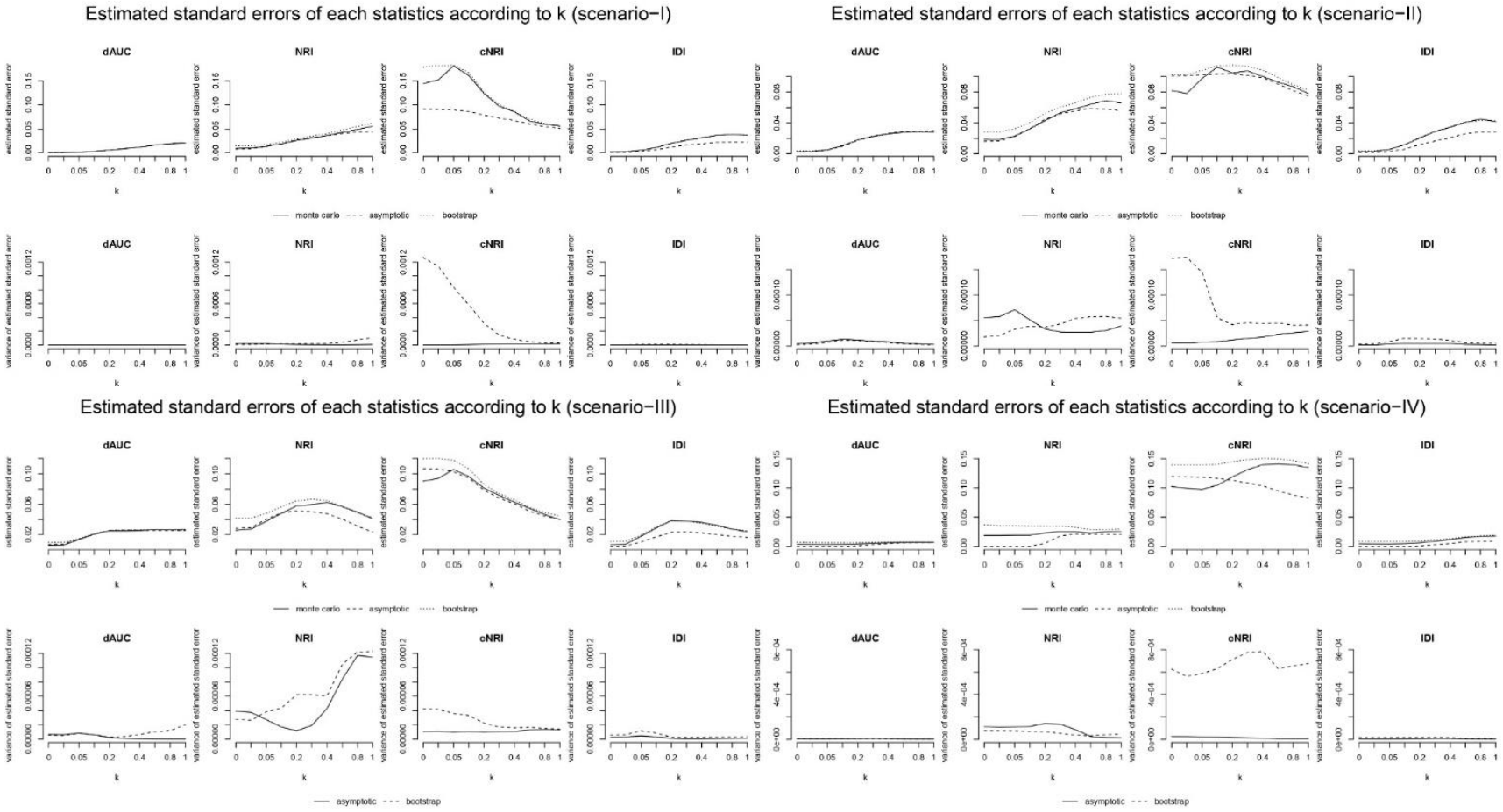

**각 Scenario에서의 모의실험 결과**

Scenario III을 제외한 나머지 모의실험에서는 모든 지표가 제1종 오류와 검정력에 큰 문제가 없었지만,
Scenario III에서 $\Delta AUC, IDI$를 제외한 $NRI, cNRI$는 Bootstrap 신뢰구간을 사용하더라도
제1종 오류를 통제하지 못하는 것을 볼 수 있다.

NRI, IDI, cNRI, dAUC, Bootstrap Confidence Intervals, Type I Error, Power

## Comparison of Evaluation Index for improving model performance using Bootstrap Confidence Intervals

# 2) Results




**각 지표의 monte carlo simulation을 통한 표준오차, 공식 기반의 표준오차, Bootstrap 표준오차**

일반적으로 $NRI, cNRI$는 세 표준오차 간의 차이가 크기 때문에 앞선 모의실험에서 문제가 생긴 것으로 생각할 수 있다.

# Numerically Stable Algorithms estimating Linear Regression Coefficients in RHadoop

## Purpose

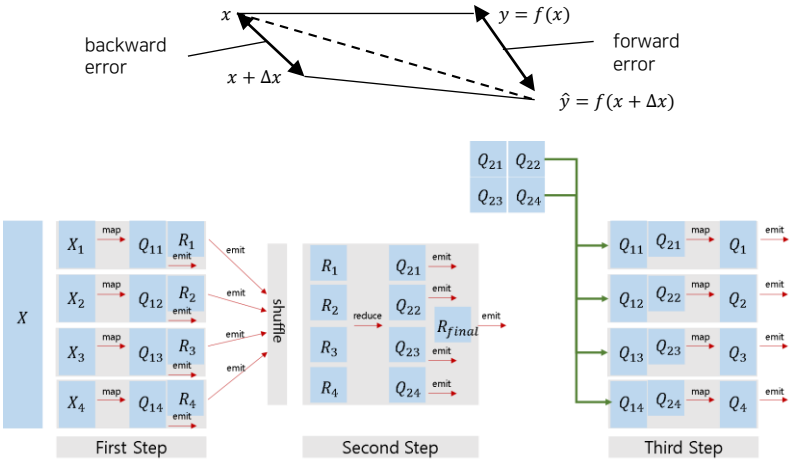
- **RHadoop**에서의 **QR분해**를 이용한 선형회귀계수 추정 알고리즘 개발
- 기존 **병렬 Normal Equation** 알고리즘과 비교

## Methodology

- **Direct TSQR** 알고리즘을 수정, 보완하여 알고리즘 작성
- **수치적 안정성(numerical stability)**과 시스템 처리시간을 기준으로 비교

## Environment

| | | |
|---|---|---|
| 노드 | master | 1 |
| | slave | 4 |
| 서버 사양 | CPU | Intel i7-8700K |
| | RAM(master/slave) | 64GB / 32GB |
| | HDD | 1TB |
| 소프트웨어 버전 | OS | Ubuntu 16.04 LTS |
| | Java | 1.8.0 |
| | Hadoop | 2.6.0 |
| | R | 3.4.4 |
| | rhdfs | 1.0.8 |
| | rmr2 | 3.3.1 |




## Issues

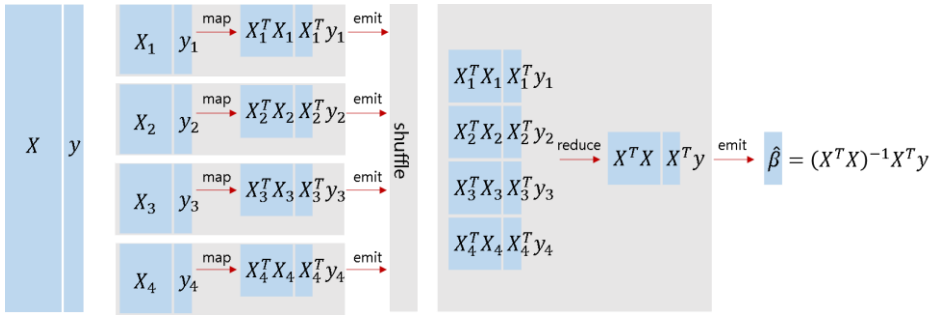
기존의 Direct TSQR 알고리즘은 **총 3단계의 맵리듀스 과정**을 거치기 때문에 비효율적

## Solutions

두 단계에 걸쳐 계산되는 $Q_1, Q_2$를 마지막에 결합하지 않고, **계산될 때마다 블록 별로 필요한 연산을 수행** (다음 페이지 참고)

# Numerically Stable Algorithms estimating Linear Regression Coefficients in RHadoop

## 1) Algorithms

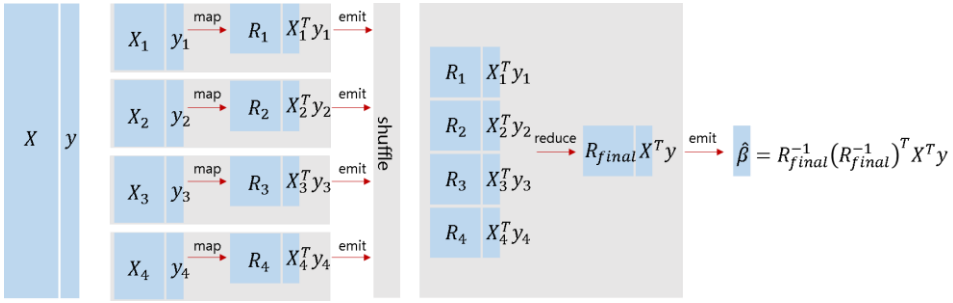


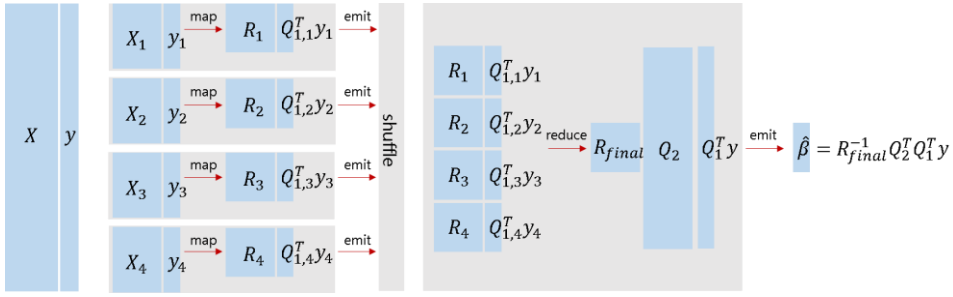

### 기존 병렬 Normal Equation 알고리즘

시스템 처리시간 빠르지만, 단일 컴퓨팅에서의 연산과 동일한 연산을 수행하기 때문에 수치적으로 불안정할 것으로 예상

### Indirect TSQR 수정 보완한 선형회귀계수 추정 알고리즘

기존 Indirect TSQR 알고리즘이 QR의 Q를 구하는데 있어 수치적으로 불안정하기 때문에 수치적으로 불안정할 것으로 예상



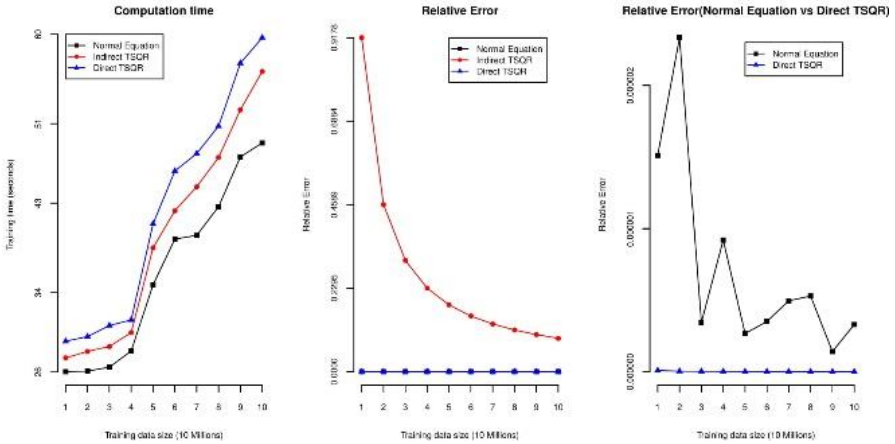




### Direct TSQR 수정 보완한 선형회귀계수 추정 알고리즘

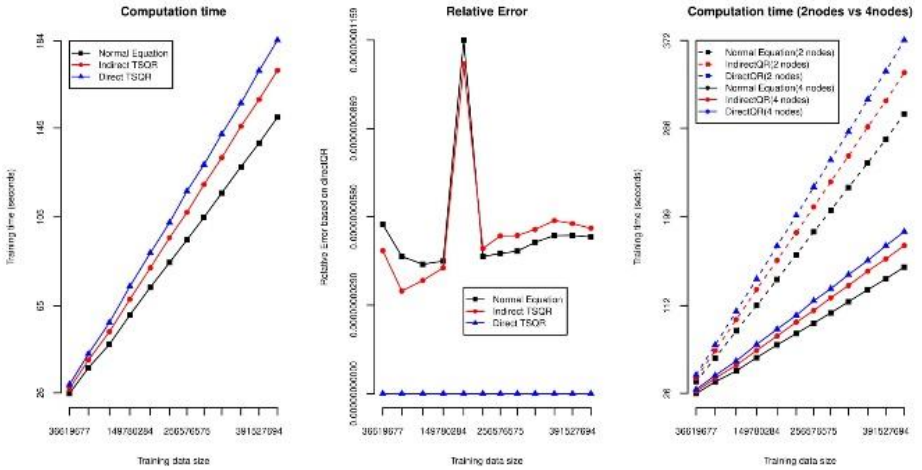
수치적으로 안정적이고 시스템 처리시간은 다른 알고리즘보다 조금 느릴 것으로 예상

# Numerically Stable Algorithms estimating Linear Regression Coefficients in RHadoop

## 2) Results




sparse한 자료에 대한 각 알고리즘의 시스템 처리시간(좌),
상대 오차(가운데, 우)




뉴욕 옐로우 택시 자료에 대한 각 알고리즘의 시스템 처리시간(좌), 상대 오차(가운데)
노드 수 2개일 때와 4개일 때의 시스템 처리시간 비교(우)

**결론**

수치적 안정성 : Normal Equation≈ Indirect TSQR ≪Direct TSQR
시스템 처리시간 : Normal Equation ≤ Indirect TSQR ≤ Direct TSQR

# Thank You

:)

Master of Science
Dept. Statistics and Actuarial Science
Soongsil University

Phone : 010-3103-7944
E-Mail : kms950216@gmail.com