

10강 모형 비교평가 I

통계·데이터과학과 장영재 교수



목차

01 평가모형

02 평가측도

03 데이터 분할에 의한 타당도 평가



1. 평가모형



01 평가 모형

- 목표변수가 존재할 때 다양한 방법으로 모형을 구축하는 경우, 예측 값이 실제 값과 동일 또는 유사하다면 예측이 잘되었다고 평가
 - 데이터마다 예측력을 평가하여 최적의 모형을 선택



01 평가 모형

1 연속형 목표 변수

- 목표변수가 연속형일 때 선형회귀모형, 회귀나무모형, 또는 신경망모형을 구축하여 각 객체의 목표변수의 예측 값 산출
 - 선형회귀모형, 회귀나무모형, 신경망모형, 그리고 랜덤포레스트에 의해 생성된 모형을 비교 평가



01 평가 모형

2 이항형 목표 변수

- 목표변수가 이항형일 때 로지스틱회귀모형, 분류나무모형, 신경망모형, 앙상블 (배깅, 부스팅, 랜덤포레스트) 등을 사용해서 각 범주를 취할 확률을 계산
 - 목표변수의 예측 값을 구하여 모형을 비교 평가



2. 평가측도



02 평가 척도

- 모형 선택시 예측력(prediction power), 해석력(interpretability), 효율성(efficiency), 안정성(stability) 등 다양한 측면을 고려
 - 데이터마이닝의 주목적이 예측이기 때문에 예측력이 가장 중요한 척도
 - 의학연구의 경우 또는 신용평가 분야에서는 예측뿐만 아니라 질병 예방을 위한 입력변수의 해석 또한 중요한 요소
 - 신용평가 분야에서 평가의 객관성을 설명하는 경우 해석력이 중요
 - 반면, 해석은 중요하지 않으나 예측만 잘하면 되는 경우도 있음
 - 응용분야에 따라 어떤 요소가 중요한지 고려하여 종합적으로 모형을 평가하여 선택하여야 함



02 평가 척도

1 연속형 목표 변수

- 목표변수가 연속형인 경우에 모형의 예측력 척도로서 MSE(Mean Squared Error) 또는 MAE(Mean Absolute Error)를 주로 사용

$$MSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 / n$$

$$MAE = \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| / n$$

- 관측값(y_i)과 예측값(\hat{y}_i) 사이에 차이가 적을수록 예측을 잘한 것이므로 MSE 또는 MAE가 작을수록 그 모형의 예측력은 높다고 할 수 있음
 - 관측값과 예측값을 가로 및 세로축으로 놓고 그린 산점도(scatter plot)가 45도 대각선을 중심으로 모여 있으면 예측력이 좋다고 할 수 있음



02 평가 측도

2 이항형 목표 변수

- 실제 범주와 예측 범주를 분류표로 만든 정오분류표를 통해 예측력을 평가
 - 목표변수의 예측 값을 구하여 모형을 비교 평가

		예측 범주		합 계
		1	0	
실제 범주	1	n_{11}	n_{10}	n_{1+}
	0	n_{01}	n_{00}	n_{0+}
합 계		n_{+1}	n_{+0}	n



02 평가 척도

2 이항형 목표 변수

■ 예측력의 척도로 민감도(sensitivity)와 특이도(specificity)를 계산

- 민감도 = $\Pr(\hat{Y} = 1 \mid Y = 1) = n_{11} / n_{1+}$
- 특이도 = $\Pr(\hat{Y} = 0 \mid Y = 0) = n_{00} / n_{0+}$
- 예측정확도 = $\Pr(\hat{Y} = 1, Y = 1) + \Pr(\hat{Y} = 0, Y = 0)$
 $= (n_{11} + n_{00}) / n$
- 오분류율 = $\Pr(\hat{Y} \neq 1, Y = 1) + \Pr(\hat{Y} \neq 0, Y = 0)$
 $= (n_{10} + n_{01}) / n$



02 평가 척도

2 이항형 목표 변수

- 민감도와 특이도는 임계치에 따라 달라지고, 임계치는 상황에 따라 다르게 결정
- 여러 가능한 임계치에 대해 (1-특이도)를 가로축에, 민감도를 세로축에 놓고 그린 그래프를 ROC(receiver operating characteristic) 곡선
- 민감도와 특이도가 모두 높을수록 예측력이 좋다고 할 수 있기 때문에 ROC 곡선이 좌상단에 가까울수록 ROC 곡선 아래 면적(AUC; area under the ROC curve)이 커지고, AUC가 클수록 예측력이 좋다고 평가



3. 데이터 분할에 의한 타당도 평가



03 데이터 분할에 의한 타당도 평가

- 예측 및 분류모형에 있어서 성능평가는 모형의 실제 활용을 위해 매우 중요한 과정
 - 대체로 모형을 적합한 데이터를 가지고 그대로 예측력을 평가하면 매우 높은 성능을 나타내는 경우가 많음
 - 모형을 적합(훈련)시키면서 이미 데이터를 바탕으로 오류를 최소화하는 규칙이 적용되었기 때문



03 데이터 분할에 의한 타당도 평가

- 경우에따라서는 모형 적합 시 높은 성능을 나타내는 모형이 실제 새로운 데이터에 대해서는 매우 낮은 예측력을 보이는 과적합(overfitting) 문제 발생
 - 적절하고 객관적으로 모형의 예측력을 평가하기 위해서는 원 데이터를, 모형을 적합하는 훈련데이터(train data)와 검증데이터(test data)로 분할할 필요
 - 모형훈련에만 사용되는 훈련 데이터와 이 훈련과정에서 사용되지 않은 성능평가용 검증 데이터로 나누어 모형적합 및 예측력 평가에 활용



다음시간 안내

11강. 모형비교평가 II

