Машинное обучение, ФКН ВШЭ
Семинар №5

1 AUC-ROC

На предыдущем занятии мы познакомились с такой важной метрикой качества бинарной классификации, как площадь под ROC-кривой (AUC-ROC). Напомним её определение. Рассмотрим задачу бинарной классификации с метками классов $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$, и пусть задан некоторый алгоритм $b(x)$, позволяющий вычислять оценку принадлежности объекта x положительному классу. AUC-ROC позволяет оценивать качество классификации для множества алгоритмов следующего вида:

$$a(x; t) = \begin{cases} -1, \ b(x) \le t, \\ +1, \ b(x) > t, \end{cases}$$

т.е. алгоритмов, присваивающих метки объектам в соответствии с оценками $b(x)$, отсекая их по некоторому порогу t. Каждый алгоритм (получающийся при фиксации значения порога t) представляется точкой на плоскости (FPR, TPR), где

$$\text{FPR} = \frac{\text{FP}}{\text{FP} + \text{TN}} = \frac{\text{FP}}{\ell_-},$$

$$\text{TPR} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} = \frac{\text{TP}}{\ell_+},$$

ℓ_-, ℓ_+ — количество объектов отрицательного и положительного классов соответственно. AUC-ROC, в свою очередь, является площадью под получившейся кривой.

Изучим подробнее некоторые важные свойства данной метрики.

Критерий AUC-ROC имеет большое число интерпретаций — например, он равен вероятности того, что случайно выбранный положительный объект окажется позже случайно выбранного отрицательного объекта в ранжированном списке, порожденном $b(x)$. Разберем подробнее немного другую формулировку.

Задача 1.1. *В ранжировании часто используется функционал «доля дефектных пар». Его можно определить и для задачи бинарной классификации.*

Пусть дан классификатор $b(x)$, который возвращает оценки принадлежности объектов классу +1. Отсортируем все объекты по неубыванию ответа классификатора b: $x_{(1)}, \dots, x_{(\ell)}$. Обозначим истинные ответы на этих объектах через $y_{(1)}, \dots, y_{(\ell)}$. Тогда доля дефектных пар записывается как

$$DP(b, X) = \frac{2}{\ell(\ell - 1)} \sum_{i<j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}].$$

Как данный функционал связан с AUC-ROC?

Решение. Для начала разберем процедуру построения ROC-кривой. Сперва все объекты сортируются по неубыванию оценки $b(x)$, тем самым формируя список $x_{(1)}, \dots, x_{(\ell)}$. После этого фиксируется значение порога $t = b(x_{(\ell)}) + 1$, в этом случае имеем

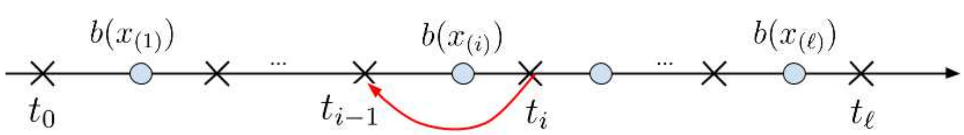
$$\mathrm{FPR} = \frac{\mathrm{FP}}{\ell_-} = \frac{0}{\ell_-} = 0,$$

$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\ell_+} = \frac{0}{\ell_+} = 0.$$

Таким образом, алгоритму $a(x; b(x_{(\ell)}) + 1)$ соответствует точка (0; 0) на плоскости, откуда начинается построение ROC-кривой.

Заметим, что для построения ROC-кривой достаточно рассмотреть $(\ell + 1)$ различных значений порога t, соответствующих всем различным способам классификации выборки, порожденным алгоритмом $b(x)$, — например, в качестве таких порогов можно рассмотреть следующий набор:

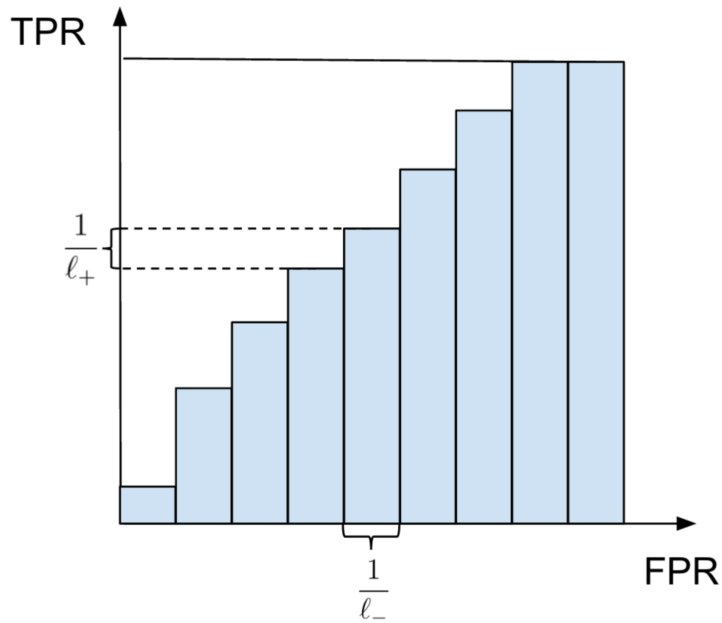
$$t_\ell = b(x_{(\ell)}) + 1,$$
$$t_i = \frac{b(x_{(i)}) + b(x_{(i+1)})}{2}, \; i = \overline{1, \ell - 1},$$
$$t_0 = b(x_{(1)}) - 1.$$



Будем перебирать пороги в порядке невозрастания их значения, начиная с t_ℓ. Пусть мы хотим уменьшить значение порога с t_i до t_{i-1}. При этом классификация объекта $x_{(i)}$ (и только его) изменится с отрицательной на положительную. Рассмотрим 2 случая.

1. $y_{(i)} = +1$. В этом случае классификатор начнет верно классифицировать объект, на котором ранее допускал ошибку, при этом FPR не изменится, а TPR повысится на $\frac{1}{\ell_+}$.

2. $y_{(i)} = -1$. В этом случае классификатор начнет ошибаться на объекте, который ранее классифицировал верно, при этом TPR не изменится, а FPR повысится на $\frac{1}{\ell_-}$.



Теперь рассмотрим, как при этом изменяется AUC-ROC. Заметим, что область под ROC-кривой состоит из непересекающихся прямоугольников, каждый из которых снизу ограничен осью FPR, а сверху — одним из горизонтальных отрезков, соответствующих второму из рассмотренных случаев. Поэтому каждый раз, когда имеет место второй случай, к текущей накопленной площади под кривой (которая изначально в точке (0; 0) равна 0) добавляется площадь прямоугольника, горизонтальные стороны которого равны $\frac{1}{\ell_-}$, а вертикальные равны $\frac{1}{\ell_+}\sum_{j=i+1}^{\ell}[y_{(j)} = +1]$ (доля уже рассмотренных положительных объектов среди всех положительных), поэтому в этом случае текущее значение AUC-ROC увеличивается на $\frac{1}{\ell_-\ell_+}\sum_{j=i+1}^{\ell}[y_{(j)} = +1]$. Итого, финальное значение AUC-ROC можно посчитать следующим образом:

$$
\begin{aligned}
\text{AUC} &= \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i=1}^{\ell}[y_{(i)} = -1]\sum_{j=i+1}^{\ell}[y_{(j)} = +1] = \\
&= \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i=1}^{\ell}\sum_{j=i+1}^{\ell}[y_{(i)} < y_{(j)}] = \\
&= \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}(1 - [y_{(i)} > y_{(j)}] - [y_{(j)} = y_{(i)}]) = \\
&= \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}(1 - [y_{(j)} = y_{(i)}]) - \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}[y_{(i)} > y_{(j)}] = \\
&= \frac{1}{\ell_+\ell_-}\frac{\ell(\ell-1)}{2} - \frac{\ell_+(\ell_+-1)}{2\ell_+\ell_-} - \frac{\ell_-(\ell_--1)}{2\ell_+\ell_-} - \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}[y_{(i)} > y_{(j)}] = \\
&= 1 - \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}[y_{(i)} > y_{(j)}].
\end{aligned}
$$

Отсюда получаем, что AUC-ROC и доля дефектных пар связаны следующим соотношением:

$$\mathrm{DP}(b, X) = \frac{2\ell_-\ell_+}{\ell(\ell-1)}(1 - \mathrm{AUC}(b, X)).$$

■

Задача 1.2. *Пусть даны выборка X, состоящая из 5 объектов, и классификатор $b(x)$, предсказывающий оценку принадлежности объекта положительному классу. Предсказания $b(x)$ и реальные метки объектов приведены ниже:*

$$\begin{aligned}
&b(x_1) = 0.2, \quad y_1 = -1,\\
&b(x_2) = 0.4, \quad y_2 = +1,\\
&b(x_3) = 0.1, \quad y_3 = -1,\\
&b(x_4) = 0.7, \quad y_4 = +1,\\
&b(x_5) = 0.05, \quad y_5 = +1.
\end{aligned}$$

Вычислите AUC-ROC для множества классификаторов $a(x; t)$, порожденного $b(x)$, на выборке X.

Решение. В соответствии с процессом построения ROC-кривой, описанным в предыдущей задаче, отсортируем оценки $b(x_i)$ в порядке их неубывания: $(b(x_{(i)}))_{i=1}^{\ell} = (0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.7)$. Также составим последовательность реальных меток объектов из этого упорядоченного списка: $(y_{(i)})_{i=1}^{\ell} = (+1, -1, -1, +1, +1)$.

Построим ROC-кривую (см. рис. 1), откуда AUC-ROC $= \frac{2}{3}$.

■

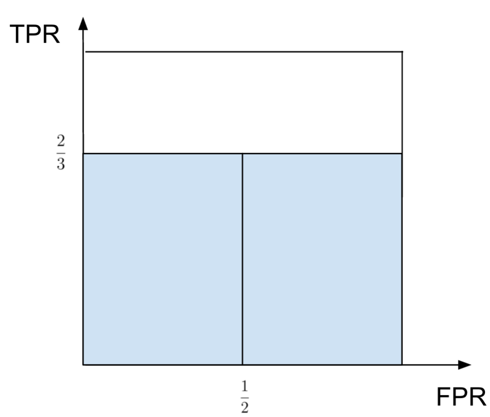


Рис. 1. Иллюстрация к задаче 1.2.

Заметим, что при вычислении AUC-ROC на некоторой выборке X для итогового классификатора $a(x; t)$ важны не конкретные значения $b(x_i)$, $i = \overline{1, \ell}$, а порядок расположения объектов в отсортированном по неубыванию списке $b(x_{(1)}), \ldots, b(x_{(\ell)})$, порожденным алгоритмом $b(x)$. Таким образом, для фиксированной выборки X алгоритм $b(x)$ задаёт перестановку на её объектах, которая в дальнейшем используется при расчёте AUC-ROC.

Задача 1.3. *Пусть $b(x)$ — классификатор, предсказывающий оценку принадлежности объекта x классу $+1$ таким образом, что для некоторой выборки X он равновероятно выдаёт на её объектах одну из всех возможных перестановок. Чему равно матожидание AUC-ROC этого классификатора?*

Решение. Как было показано в задаче 1.1, для AUC-ROC верно

$$\mathrm{AUC} = \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1],$$

поэтому

$$\mathbb{E}\mathrm{AUC} = \frac{1}{\ell_+\ell_-}\sum_{i<j}^{\ell}\mathbb{E}([y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]).$$

Заметим, что величина $[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]$ принимает значения 0 и 1, поэтому

$$\mathbb{E}([y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]) = \mathbb{P}(y_{(i)} = -1,\, y_{(j)} = +1) = \frac{\ell_-\ell_+(\ell-2)!}{\ell!} = \frac{\ell_-\ell_+}{\ell(\ell-1)}.$$

Отсюда имеем

$$\mathbb{E}\mathrm{AUC} = \frac{1}{\ell_-\ell_+}\sum_{i<j}^{\ell}\frac{\ell_-\ell_+}{\ell(\ell-1)} = \frac{\ell(\ell-1)}{2}\frac{1}{\ell(\ell-1)} = \frac{1}{2}.$$

■

Итого, можем заметить, что значение AUC-ROC, близкое к $\frac{1}{2}$, означает, что классификатор близок к случайному, тогда как значение, равное 1, означает, что классификатор безошибочно классифицирует объекты при некотором значении порога.

Задача 1.4. *Пусть $b(x)$ — некоторый классификатор, предсказывающий оценку принадлежности объекта x положительному классу, и при этом AUC-ROC множества классификаторов $a(x;t)$, порожденных $b(x)$, на некоторой выборке X принимает значение, меньшее 0.5. Как можно скорректировать прогнозы классификаторов $a(x;t)$, чтобы они были более осмысленными по сравнению с прогнозами классификатора, выдающего случайные ответы?*

Решение. Заметим, что, поскольку AUC-ROC < 0.5, то ROC-кривая находится под диагональю единичного квадрата.

Для некоторого классификатора $a(x;t)$ рассмотрим классификатор $a^*(x;t)$, выдающий противоположные метки по сравнению с $a(x;t)$, т.е.:

$$a^*(x;t) = -a(x;t).$$

При этом будут выполняться соотношения

$$\mathrm{TPR}(a^*, X) = \mathrm{FPR}(a, X),$$
$$\mathrm{FPR}(a^*, X) = \mathrm{TPR}(a, X),$$

поэтому классификатор $a^*(x; t)$ будет представлен на плоскости точкой, симметричной точке, отвечающей классификатору $a(x; t)$, относительно диагонали единичного квадрата. Заметим, что это верно для всех значений t, поэтому каждой точке исходной ROC-кривой, расположенной под диагональю единичного квадрата, будет соответствовать точка, расположенная над ней. В связи с этим AUC-ROC множества классификаторов $a^*(x; t)$ принимает значение, большее 0.5, а прогнозы классификаторов $a^*(x; t)$ более осмысленны по сравнению со случайным классификатором.

■

2 Предсказание вероятностей

Разберемся, каким требованиям должен удовлетворять классификатор, чтобы его выход можно было расценивать как оценку вероятности класса.

Пусть в каждой точке $x \in \mathbb{X}$ пространства объектов задана вероятность $p(y = +1 \,|\, x)$ того, что данный объект относится к классу $+1$, и пусть алгоритм $b(x)$ возвращает числа из отрезка $[0, 1]$. Потребуем, чтобы эти предсказания пытались в каждой точке x приблизить вероятность положительного класса $p(y = +1|x)$.

Разумеется, выполнение этого требования зависит от функции потерь — минимум ее матожидания в каждой точке x должен достигаться на данной вероятности:

$$\arg\min_{b \in \mathbb{R}} \mathbb{E}\left[L(y, b)|x\right] = p(y = +1|x).$$

Задача 2.1. *Покажите, что квадратичная функция потерь $L(y, z) = ([y = +1] - z)^2$ позволяет предсказывать корректные вероятности.*

Решение. Заметим, что поскольку алгоритм возвращает числа от 0 до 1, то его ответ должен быть близок к единице, если объект относится к положительному классу, и к нулю — если объект относится к отрицательному классу.

Запишем матожидание функции потерь в точке x:

$$\mathbb{E}\left[L(y, b)|x\right] = p(y = +1|x)(b - 1)^2 + (1 - p(y = +1|x))(b - 0)^2.$$

Продифференцируем по b:

$$\frac{\partial}{\partial b}\mathbb{E}\left[L(y, b)|x\right] = 2p(y = +1|x)(b - 1) + 2(1 - p(y = +1|x))b = 2b - 2p(y = +1|x) = 0.$$

Легко видеть, что оптимальный ответ алгоритма действительно равен вероятности:

$$b = p(y = +1|x).$$

■

Задача 2.2. *Покажите, что абсолютная функция потерь* $L(y,z) = |[y=+1]-z|$, $z \in [0;1]$, *не позволяет предсказывать корректные вероятности.*

Решение. Запишем матожидание функции потерь в точке x:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[L(y,b)|x\right] =& p(y=+1|x)|1-b| + (1-p(y=+1|x))|b| = \\ &= p(y=+1|x)(1-b) + (1-p(y=+1|x))b.\end{aligned}$$

Продифференцируем по b:

$$\frac{\partial}{\partial b}\mathbb{E}\left[L(y,b)|x\right] = 1 - 2p(y=+1|x) = 0.$$

Рассмотрим 2 случая:

1. $p(y=+1|x) = \frac{1}{2}$. Тогда $\mathbb{E}\left[L(y,b)|x\right] = \frac{1}{2} \quad \forall b \in [0;1]$, а потому классификатор не позволяет предсказывать корректную вероятность в точке x.

2. $p(y=+1|x) \neq \frac{1}{2}$. В этом случае интервал $(0;1)$ не содержит критических точек, а потому минимум матожидания достигается на одном из концов отрезка $[0;1]$:

$$\begin{aligned}\min_{b\in[0;1]} \mathbb{E}\left[L(y,b)|x\right] = \min\left(\mathbb{E}\left[L(y,0)|x\right], \mathbb{E}\left[L(y,1)|x\right]\right) = \\ \min\left(p(y=+1|x), 1-p(y=+1|x)\right).\end{aligned}$$

   Отсюда $\arg\min_{b\in[0;1]} \mathbb{E}\left[L(y,b)|x\right] \in \{0,1\}$, а потому классификатор также не позволяет предсказывать корректную вероятность в точке x.

■

3 SVM

Будем рассматривать задачу бинарной классификации с метками $\mathbb{Y} = \{-1,+1\}$ и линейные классификаторы вида

$$a(x) = \operatorname{sign}\langle w, x\rangle + b, w \in \mathbb{R}^d, b \in \mathbb{R}.$$

На лекции были приведены оптимизационные задачи метода опорных векторов (SVM) для случаев линейно разделимой и неразделимой выборок. Напомним, как выглядит задача для второго случая:

$$\begin{cases}\frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{\ell}\xi_i \to \min_{w,b,\xi}, \\ y_i(\langle w, x_i\rangle + b) \geq 1 - \xi_i, \quad i = \overline{1,\ell}, \\ \xi_i \geq 0, \quad i = \overline{1,\ell}.\end{cases}$$

Поскольку выборка не является линейно разделимой, решить исходную оптимизационную задачу не представляется возможным, в связи с чем вводятся штрафы ξ_i, $i = \overline{1,\ell}$, для объектов за попадание внутрь разделяющей полосы. При этом излишний акцент на максимизации отступа приводит к большой ошибке на обучении, а «подгонка» под обучающую выборку, как правило, приводит к маленькой ширине разделяющей полосы. В связи с этим гиперпараметр C отвечает за то, какая из указанных целей является более приоритетной, — чем больше значение C, тем сильнее модель будет настраиваться на обучающую выборку.