Машинное обучение, ФКН ВШЭ
Семинар №5

1 AUC-ROC

На лекции 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 семейства 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, и пусть все значения $b(x_i)$, $i = \overline{1, \ell}$, для некоторой выборки $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$ различны. Отсортируем все объекты по возрастанию ответа классификатора: $b(x_{(1)}) < \dots < b(x_{(\ell)})$. Обозначим истинные ответы на этих объектах *через $y_{(1)}, \ldots, y_{(\ell)}$. 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 $x_{(1)}, \ldots, x_{(\ell)}$. 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:

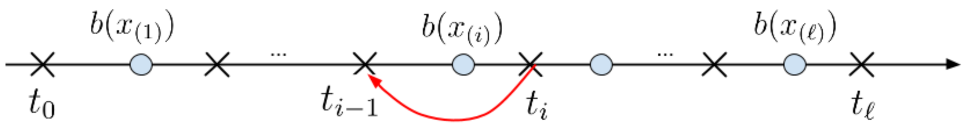
$$\begin{aligned}
&t_\ell = b(x_{(\ell)}) + 1,\\
&t_i = \frac{b(x_{(i)}) + b(x_{(i+1)})}{2},\ i = \overline{1, \ell-1},\\
&t_0 = b(x_{(1)}) - 1.
\end{aligned}$$

Зафиксируем значение порога $t = t_\ell = b(x_{(\ell)}) + 1$, в этом случае имеем

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

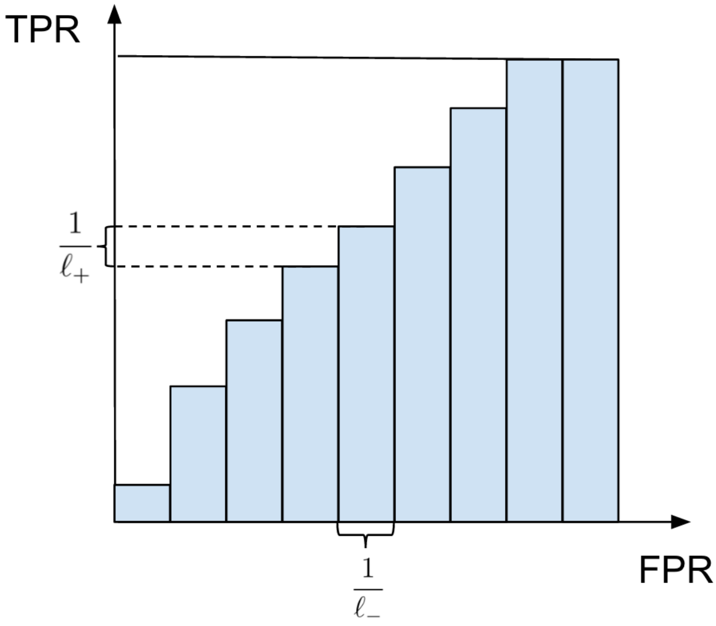
$$\mathrm{TPR} = \frac{\mathrm{TP}}{\ell_+} = \frac{0}{\ell_+} = 0.$$

Таким образом, алгоритму $a(x; t_\ell)$ соответствует точка (0; 0) на плоскости, откуда начинается построение ROC-кривой. 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:

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

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

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

■

Заметим, что в случае, когда несколько объектов выборки имеют равные значения $b(x)$, при уменьшении значения порога с $t_i > b(x)$ до $t_{i-1} < b(x)$, где x — один из таких объектов, изменение значений FPR и TPR происходит одновременно, поэтому соответствующий участок ROC-кривой будет наклонным, а не горизонтальным или вертикальным.

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 $= \frac{2}{3}$.

■

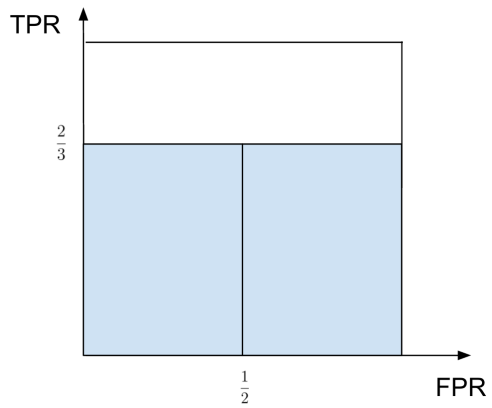


Рис. 1. Иллюстрация к задаче 1.2.

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 $b(x_{(1)}), \dots, b(x_{(\ell)})$, 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

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

■

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.

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 TP и FP на обучающей выборке для некоторого классификатора $a^*(x;t)$ будут принимать следующие значения:

$$\mathrm{TP}(a^*(x;t), X) = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a^*(x;t) = +1] =$$
$$= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a(x;t) = -1] = \mathrm{FN}(a(x;t), X),$$
$$\mathrm{FP}(a^*(x;t), X) = \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a^*(x;t) = +1] =$$
$$= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a(x;t) = -1] = \mathrm{TN}(a(x;t), X).$$

Отсюда имеем

$$\mathrm{TPR}(a^*(x;t), X) = \frac{\mathrm{TP}(a^*(x;t), X)}{\ell_+} = \frac{\mathrm{FN}(a(x;t), X)}{\ell_+} =$$
$$= \frac{\ell_+ - \mathrm{TP}(a(x;t), X)}{\ell_+} = 1 - \mathrm{TPR}(a(x;t), X),$$
$$\mathrm{FPR}(a^*(x;t), X) = \frac{\mathrm{FP}(a^*(x;t), X)}{\ell_-} = \frac{\mathrm{TN}(a(x;t), X)}{\ell_-} =$$
$$= \frac{\ell_- - \mathrm{FP}(a(x;t), X)}{\ell_-} = 1 - \mathrm{FPR}(a(x;t), X),$$

поэтому классификатор $a^*(x;t)$ будет представлен на плоскости точкой, симметричной точке, отвечающей классификатору $a(x;t)$, относительно точки $(0.5; 0.5)$.

Рассмотрим ROC-кривую для множества классификаторов $a(x;t)$. Пусть площадь областей единичного квадрата, находящихся между его диагональю и частями ROC-кривой, расположенных под ней, равна S_-, а между диагональю и частями ROC-кривой, расположенных над диагональю, — S_+. Тогда AUC-ROC для такой кривой принимает значение $0.5 + S_+ - S_- < 0.5$ (по условию), отсюда $S_+ - S_- < 0$.

Как было показано ранее, ROC-кривая для множества классификаторов $a^*(x;t)$ симметрична ROC-кривой для множества классификаторов $a(x;t)$, а потому для первой кривой область, соответствующая площади S_-, будет расположена над диагональю единичного квадрата, площади S_+ — под диагональю. Отсюда AUC-ROC для множества классификаторов $a^*(x;t)$ будет принимать значение $0.5 - S_+ + S_- > 0.5$, а потому прогнозы классификаторов из этого множества более осмысленны по сравнению со случайным классификатором.

∎

Задача 1.5. *На ответах алгоритма $b(x)$, отнормированных на интервал от 0 до 1, объекты отрицательного класса распределены с плотностью $p(b) = 2 - 2b$, а объекты положительного класса распределены с плотностью $p(b) = 2b$ (см. рис. 2). Выпишите формулу для ROC-кривой и посчитайте площадь под ней.*

Решение. Для выбранного порога бинаризации t значение TPR будет равно отношению площади трапеции, отсекаемой вертикальной прямой $y = t$ под синей прямой

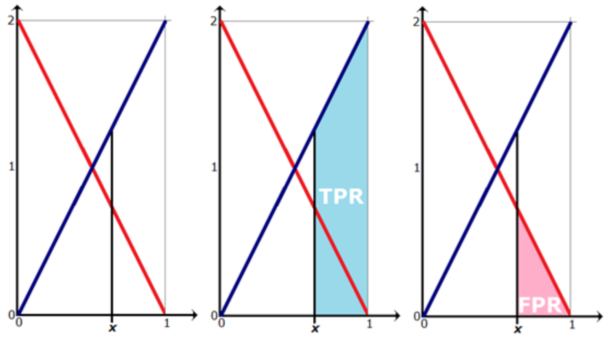


Рис. 2. Распределение объектов положительного и отрицательного классов

(см. рисунок) к площади всего треугольника под синей прямой. Площадь под синей прямой равна единице (во-первых, по условию синяя прямая задаёт плотность, во-вторых, можно проверить вручную). Площадь трапеции можно выразить как разность площадей треугольников: $TPR(t) = 1-\frac{t\cdot 2t}{2} = 1-t^2$. Для FPR идея аналогичная, но нужно посчитать площадь треугольника, а не трапеции: $FPR(t) = \frac{1}{2}(1-t)(2-2t) = (1-t)^2$. Теперь можно выразить TPR через FPR: $TPR(t) = 1-(1-\sqrt{FPR(t)})^2 = 2\sqrt{FPR(t)} - FPR(t)$. Значит, ROC-кривая задаётся уравнением $y = 2\sqrt{x} - x$. График этой кривой можно увидеть на рис. 3. Площадь под ней можно посчитать, взяв следующий интеграл:

$$\int\limits_0^1 (2\sqrt{x} - x)dx = \left(\frac{4}{3}x^{\frac{3}{2}} - \frac{1}{2}x^2\right)\Big|_0^1 = \frac{5}{6}.$$

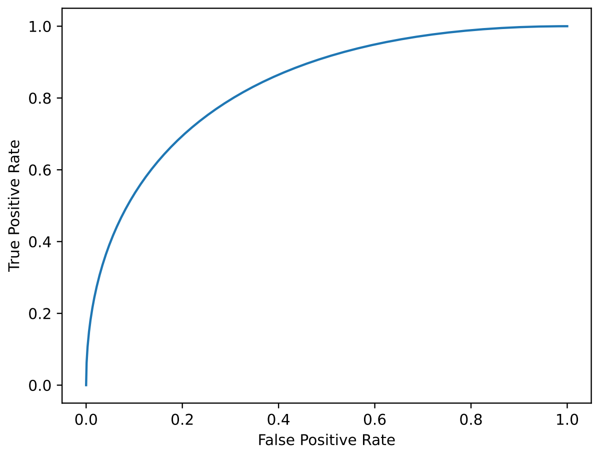


Рис. 3. ROC-кривая из задачи 1.5

■

Задача 1.6. *Пусть в выборке* X *всего* ℓ_+ *объектов положительного класса и* ℓ_- *объектов отрицательного класса. Пусть* A_{xy} *– это множество всех перестановок элементов* X*, для которых можно выбрать порог так, чтобы получить* $FP = x, FN = y$*. Чему равно математическое ожидание AUC ROC для классификатора, равновероятно выдающего одну из перестановок из множества* A_{xy}*?*

Решение. Для AUC ROC верно

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

Заметим, что если для перестановки возможно выбрать порог классификации, удовлетворяющий $FP = x, FN = y$, то сделать это можно единственным способом. Чтобы получить $FN = y$, нам нужно иметь $TP = \ell_+ - y$; чтобы получить $FP = x$, должно выполняться $TN = \ell_- - x$. Значит, порог отделяет $N = \ell_- - x + y$ наименьших элементов от $\ell_+ - y + x$ наибольших элементов. Тогда разобьём сумму из выражения выше на 3 части:

1. $A_1 = \sum\limits_{i\leqslant N<j}^{\ell}[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]$ – сумма по парам, лежащим по разные стороны от порога. Эту сумму легко посчитать: она равна произведению $TN \cdot TP = (\ell_- - x)(\ell_+ - y)$.

2. $A_2 = \sum\limits_{i<j}^{N}[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]$ – сумма по парам, оба элемента в которых меньше порога (помечены моделью как отрицательные). Введём $1 \leqslant \alpha_1 < \ldots < \alpha_y \leqslant N$ – позиции ложноотрицательных объектов. Через них эту сумму можно переписать так:

$$A_2 = \sum_{j=2}^{N}[y_{(j)} = +1]\sum_{i=1}^{j-1}[y_{(i)} = -1] = \sum_{k=1}^{y}\sum_{i=1}^{\alpha_k-1}[y_{(i)} = -1] = \sum_{k=1}^{y}(\alpha_k - k) =$$

$$= \sum_{k=1}^{y}\alpha_k - \frac{y(y+1)}{2}.$$

3. $A_3 = \sum\limits_{N<i<j}^{\ell}[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]$ – сумма по парам, оба элемента в которой больше порога (помечены моделью как положительные). Аналогично прошлому пункту введём $N < \beta_1 < \ldots < \beta_x \leqslant l$ – позиции ложноположительных объектов. Через них эту сумму можно переписать так:

$$A_3 = \sum_{i=N+1}^{\ell}[y_{(i)} = -1]\sum_{j=i+1}^{\ell}[y_{(j)} = +1] = \sum_{k=1}^{x}\sum_{j=\beta_k+1}^{\ell}[y_{(j)} = +1] = \sum_{k=1}^{x}(\ell - \beta_k - (x-k)) =$$

$$= x(\ell - x) + \frac{x(x+1)}{2} - \sum_{k=1}^{x}\beta_k = x\ell - \frac{x(x-1)}{2} - \sum_{k=1}^{x}\beta_k.$$

В итоге AUC можно записать так:

$$\frac{A_1 + A_2 + A_3}{\ell_+\ell_-} = \frac{1}{\ell_+\ell_-}\left(\ell_+\ell_- + xy + \ell_-(x-y) - \frac{y(y+1)}{2} - \frac{x(x-1)}{2} + \sum_{k=1}^{y}\alpha_k - \sum_{k=1}^{x}\beta_k\right)$$

Теперь для подсчёта математического ожидания всего выражения нам достаточно посчитать математическое ожидание α_k и β_k. При фиксированном значении

$\alpha_k = s$ есть C_{s-1}^{k-1} вариантов выбрать меньшие α и C_{N-s}^{y-k} вариантов выбрать бОльшие α (считаем, что если в биномиальном коэффициенте C_n^k выполнено $n < k$, то он равен нулю). Всего вариантов выбрать позиции для ложноположительных элементов – C_N^y. Тогда по определению математическое ожидание записывается так:

$$\mathbb{E}\alpha_k = \frac{\sum\limits_{s=1}^{N} sC_{s-1}^{k-1}C_{N-s}^{y-k}}{C_N^y}$$

Выпишем математическое ожидание суммы (воспользуемся свёрткой Вандермонда):

$$\mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{y}\alpha_k\right) = \frac{\sum\limits_{s=1}^{N} s\sum\limits_{k=1}^{y} C_{s-1}^{k-1}C_{N-s}^{y-k}}{C_N^y} = \frac{\sum\limits_{s=1}^{N} sC_{N-1}^{y-1}}{C_N^y} = \frac{N(N+1)}{2}\frac{(N-1)!}{(y-1)!(N-y)!}\frac{y!(N-y)!}{N!} =$$

$$= \frac{y(N+1)}{2}.$$

Для математического ожидания β_k аналогичным способом получаем формулы:

$$\mathbb{E}\beta_k = \frac{\sum\limits_{s=N+1}^{\ell} sC_{s-N-1}^{k-1}C_{\ell-s}^{x-k}}{C_{\ell-N}^x}; \quad \mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{x}\beta_k\right) = \frac{\sum\limits_{s=N+1}^{\ell} sC_{\ell-N-1}^{x-1}}{C_{\ell-N}^x} = \frac{x(\ell+N+1)}{2}.$$

Подставим в обе формулы $N = \ell_- - x + y$:

$$\mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{y}\alpha_k\right) = \frac{y(\ell_- - x + y + 1)}{2}; \quad \mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{x}\beta_k\right) = \frac{x(\ell + \ell_- - x + y + 1)}{2}.$$

Тогда при подстановке в итоговую формулу получаем

$$\mathbb{E}\mathrm{AUC} = \frac{1}{\ell_+\ell_-}\left(\ell_+\ell_- - \frac{1}{2}\left(y\ell_- + x\ell_+\right)\right) = 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{y}{\ell_+} + \frac{x}{\ell_-}\right).$$

■

Задача 1.7. *У банка всего 4000 клиентов. Маркетингового бюджета нового предложения банка хватит на то, чтобы обзвонить 800 клиентов. По историческим данным аналитики банка выяснили, что лишь 6% клиентов действительно начинают пользоваться новым предложением после маркетингового звонка. У компании уже есть два классификатора A и B, для которых положительный класс – это клиенты, которые отреагируют на маркетинговый звонок, а отрицательный – клиенты, на которых он не повлияет. Известно, что для A $FPR = 0.1, TPR = 0.2$, а для B $FPR = 0.25, TPR = 0.6$. Постройте на их основе классификатор, который выберет ровно 800 клиентов для совершения маркетинговых звонков.*

Решение. Запишем условие на то, что классификатор выберет ровно 800 клиентов: $FPR \cdot \ell_- + TPR \cdot \ell_+ = 800$. Это можно представить в виде прямой, заданной в том же пространстве, что и ROC-кривая. Чему равны ℓ_- и ℓ_+ в нашем случае? Воспользуемся данными аналитиков и получим, что среди всех клиентов будет $0.06 \cdot 4000 = 240$ клиентов, относящихся к положительному классу, и 3760 клиентов, относящихся к отрицательному классу.

Посмотрим, сколько объектов положительного класса нам выдадут классификаторы A и B. Для A: $0.1 \cdot 3760 + 0.2 \cdot 240 = 424$ – слишком мало Для B: $0.25 \cdot 3760 + 0.6 \cdot 240 = 1084$ – слишком много.

Проведём отрезок между точками A и B в пространстве ROC-кривой. Заметим, что мы можем получить любой классификатор с парой характеристик (FPR, TPR), лежащей на этом отрезке. Для этого нам достаточно брать предсказания данных двух классификаторов с вероятностями, пропорциональными расстояниям от точки до концов отрезков.

Выпишем уравнение прямой, проходящей через точки A и B, и найдём её точку пересечения с прямой, заданной в условии. Для прямой, проходящей через точки A и B верно, что

$$\begin{cases} 0.2 = a \cdot 0.1 + b \\ 0.6 = a \cdot 0.25 + b \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} b = 0.2 - a \cdot 0.1 \\ 0.4 = a \cdot 0.15 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} a = \frac{8}{3} \\ b = -\frac{1}{15} \end{cases}.$$

Значит, нам надо найти точку пересечения прямых $TPR = \frac{8}{3} \cdot FPR - \frac{1}{15}$ и $TPR = \frac{10}{3} - \frac{47}{3} \cdot FPR$. Получаем точку $FPR = \frac{51}{275}, TPR = \frac{353}{825}$. Осталось посчитать отношение, в котором эта точка делит отрезок:

$$\frac{\frac{51}{275} - \frac{1}{10}}{\frac{1}{4} - \frac{1}{10}} = \frac{94}{165}.$$

Значит, для получения искомого классификатора с вероятностью $\frac{94}{165} \approx 0.57$ надо брать предсказание классификатора B, иначе – предсказание классификатора A. Иллюстрацию к задаче можно найти на рис. 4.

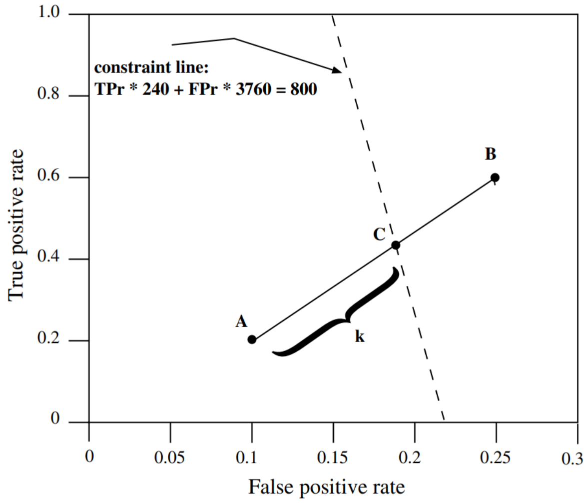


Рис. 4. Иллюстрация к задаче 1.7.

∎

Задача 1.8. *Зафиксируем число объектов положительного (ℓ_+) и отрицательного (ℓ_-) классов. Докажите, что ROC-кривая классификатора A не ниже ROC-кривой классификатора B в любой точке тогда и только тогда, когда PR-кривая классификатора A не ниже PR-кривой классификатора B в любой точке.*

Решение. Докажем, что если ROC-кривая выше, то и PR-кривая выше. Выберем для двух классификаторов такие пороги t_1 и t_2, что $TPR_A(t_1) = TPR_B(t_2)$. Проверим, как при этом соотносятся их точности. Известно, что ROC-кривая A выше ROC-кривой B, поэтому $FPR_A(t_1) \leqslant FPR_B(t_2) \Leftrightarrow FP_A(t_1) \leqslant FP_B(t_2)$. Вспомним формулу для точности: $PR_A(t) = \frac{TP_A(t)}{TP_A(t)+FP_A(t)}$. Из условия $TPR_A(t_1) = TPR_B(t_2)$ следует равенство $TP_A(t_1) = TP_B(t_2)$, а значит, $PR_A(t_1)$ и $PR_B(t_2)$ отличаются только за счёт FP в знаменателе. Воспользовавшись полученным выше неравенством на FP, получаем, что $PR_A(t_1) \geqslant PR_B(t_2)$, ч.т.д..

Доказательство в обратную сторону проделывается абсолютно аналогично: надо зафиксировать пороги с равной полнотой и сравнить точности. Как и в прошлом случае, точности будут отличаться только за счёт FP, так что из неравенства точностей мы получим неравенство для FPR.

■

Задача 1.9. *Рассмотрим задачу классификации с выборкой X и долей объектов с $y = +1$ равной 0.5. Разделим ее на две равные части: X_1 и X_2. Баланс классов в них равен p_1 и p_2 соответственно. Легко показать, что $p_1 = 1 - p_2$.*

Будем говорить, что X_1 и X_2 – это два сегмента нашей выборки. На них используются два разных классификатора $a_1(x)$ и $a_2(x)$. Модель на всей выборке можно записать так:

$$a(x) = a_1(x)\ [x \in X_1] + a_2(x)\ [x \in X_2]$$

Пусть на каждом сегменте работает случайный классификатор:

$$AUC(a_1) = AUC(a_2) = 0.5$$

Может ли $AUC(a)$ быть больше? Каким может быть качество модели на всей выборке?

Решение. Воспользуемся вероятностным определением метрики ROC AUC:

$$\mathrm{AUC}\,(a) = \mathbb{P}\big\{a(x_i) > a(x_j) \mid y_i = +1,\ y_j = -1\big\}$$

Проведем вероятностный эксперимент: выберем случайный объект положительного класса и случайный объект отрицательного класса. Вероятность того, что на первом объекте ответ модели больше, и является ROC AUC модели.

Рассмотрим такой вероятностный эксперимент для классификатора a. Случайный *положительный* объект принадлежит первому сегменту X_1 с вероятностью

$$\frac{p_1}{p_1 + p_2} = \frac{p_1}{p_1 + 1 - p_1} = p_1$$

И с вероятностью $1 - p_1$ – второму сегменту, X_2.

Аналогично случайный *отрицательный* объект принадлежит первому сегменту X_1 с вероятностью

$$\frac{1-p_1}{1-p_1+1-p_2} = \frac{1-p_1}{1-p_1+p_1} = 1-p_1$$

И с вероятностью p_1 – второму сегменту, X_2.

Если и положительный, и отрицательный объект принадлежат X_1, то

$$\mathbb{P}\left\{a(x_i) > a(x_j) \mid y_i = +1,\ y_j = -1,\ x_i,\ x_j \in X_1\right\} = \mathrm{AUC}\,(a_1) = 0.5$$

Обозначим эту вероятность auc_{11}. Оба объекта принадлежат первому сегменту с вероятностью $\delta_{11} = p_1(1-p_1)$. Аналогично с вероятностью $\delta_{22} = p_1(1-p_1)$ оба объекта принадлежат X_2, и $auc_{22} = 0.5$.

Но что будет, если положительный объект из X_1, а отрицательный из X_2? Предположим, что предсказания модели на первом сегменте *всегда больше* предсказаний модели на втором.

$$a_1(x_i) > a_2(x_j) \quad \forall x_i \in X_1,\ x_j \in X_2$$

Тогда $\mathrm{auc}_{12} = 1$, и это происходит с вероятностью $\delta_{12} = p_1^2$. А с вероятностью $\delta_{21} = (1-p_1)^2$ получим положительный объект из X_2 и отрицательный – из X_1. В этом случае $\mathrm{auc}_{21} = 0$.

Вычислим $\mathrm{AUC}\,(a)$ по формуле полной вероятности:

$$\begin{aligned}\mathrm{AUC}\,(a) &= \mathrm{auc}_{11}\,\delta_{11} + \mathrm{auc}_{12}\,\delta_{12} + \mathrm{auc}_{21}\,\delta_{21} + \mathrm{auc}_{22}\,\delta_{22} = \\ &= 0.5p_1(1-p_1) + p_1^2 + 0.5p_1(1-p_1) = p_1\end{aligned}$$

Получаем, что $\mathrm{AUC}\,(a)$ *может принимать любые значения от 0 до 1.*

Качество на всей выборке зависит от баланса классов на подвыборках после разбиения на сегменты. Если это разбиение случайно ($p_1 = p_2 = 0.5$), то и качество на всей выборке не будет отличаться от качества на отдельных сегментах. Если же разбиение на сегменты *информативно*, то сам этот факт может усилить модель.

■

§1.1 Прямая оптимизация AUC-ROC

При обучении модели в бинарной классификации чаще всего решается задача минимизации верхней оценки функционала ошибки:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}[a(x_i) \neq y_i] \leq \frac{1}{\ell}\sum_{i=1}^{\ell}\tilde{L}(M_i) \to \min_w$$

Однако иногда возникает необходимость оптимизировать более сложные метрики — в частности, AUC-ROC. Напрямую оптимизировать подобные метрики не представляется возможным из-за их дискретной структуры, однако мы можем использовать трюк с верхней оценкой функционала ошибки и в этом случае. В задаче 1.1 мы показали, что AUC-ROC связан с долей дефектных пар в выборке, поэтому максимизация AUC-ROC равносильна минимизации доли дефектных пар.

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

$$\frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i<j}^{\ell} [y_i < y_j][b(x_j) - b(x_i) < 0] \leq \frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i<j}^{\ell} [y_i < y_j] \tilde{L}(b(x_j) - b(x_i)) \to \min_b$$

Если верхняя оценка $\tilde{L}$ дифференцируема по параметрам модели, то можно оптимизировать такой функционал при помощи градиентных методов.