分类任务中常用性能指标

【参考资料】

周志华 《机器学习》

机器学习之分类性能度量指标 : ROC曲线、AUC值、正确率、召回率

AUC的计算方法

AUC的计算方法总结

1. 混淆矩阵

二分类问题的混淆矩阵（confusion matrix）如下：

	预测类别			
实际类别		Yes	No	总计
	Yes	TP	FN	P（实际为 Yes）
	No	FP	TN	N（实际为 No）
	总计	P'（被分为 Yes）	N'（被分为 No）	P+N

- **真正例（True Positives，TP）**：被正确地划分为正例的个数，即实际为正例且被分类器划分为正例的实例数；
- **假正例（False positives，FP）**：被错误地划分为正例的个数，即实际为负例但被分类器划分为正例的实例数；
- **假反例（False Negatives，FN）**：被错误地划分为负例的个数，即实际为正例但被分类器划分为负例的实例数；
- **真反例（True Negatives，TN）**：被正确地划分为负例的个数，即实际为负例且被分类器划分为负例的实例数。

其中，$P = TP + FN$表示实际为正例的样本个数，N，P'，N'同理。基于混淆矩阵，可以得到一系列指标，详见下文。

2. 正确率&错误率

- **正确率（accuracy）**：正确率是最常见的评价指标，是被分对的样本数在所有样本数中的占比，计算如下

$$\text{accuracy} = \frac{TP + TN}{P + N}$$

- **错误率（error rate）**：与正确率相反，描述被分类器错分的比例，即

$$\text{error rate} = \frac{FP + FN}{P + N}$$

分对与分错是互斥事件，所以$\text{accuracy} = 1 - \text{error rate}$。

3. 灵敏度&特效度

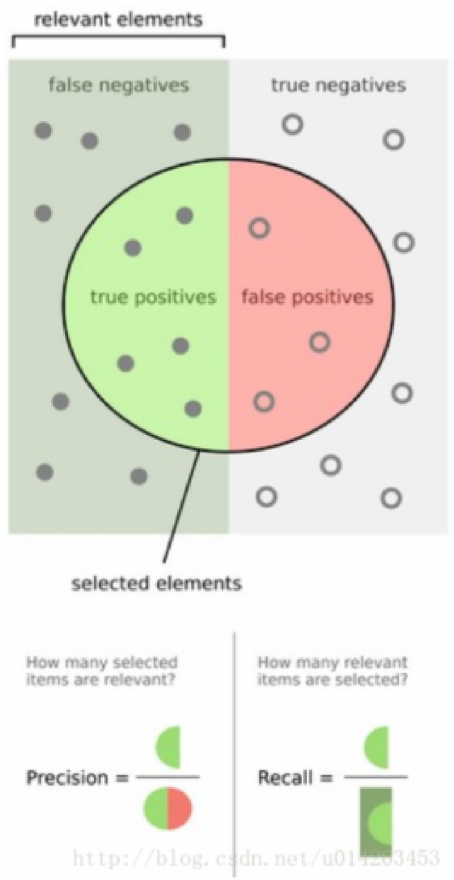
- **灵敏度（sensitivity）**：表示所有正例中被分对的比例，衡量了分类器对正例的识别能力
$$\text{sensitivity} = \frac{TP}{P}$$
- **特效度（specificity）**：表示所有负例中被分对的比例，衡量了分类器对负例的识别能力
$$\text{specificity} = \frac{TN}{N}$$

对于多分类问题来说，这一对指标实际上就是针对每个单独类别的分类正确率，它们作为独立概念出现的情况不多。需要注意的是，$\text{sensitivity} + \text{specificity} \neq \text{accuracy}$。

4. 精度&召回率

- **精度（precision）**：精度又称为查准率，是精确性的度量，表示被分为正例的示例中实际为正例的比例，计算方式如下
$$\text{precision} = \frac{TP}{TP + FP}$$
注意精度和正确率（accuracy）不是一个概念。（*注：有些资料中也把accuracy翻译为精度，为了防止混淆，这里统一将accuracy称为正确率，precision称为精度*）
- **召回率（Recall）**：召回率又称为查全率，是覆盖面的度量，度量有多个正例被分为正例，计算如下
$$\text{recall} = \frac{TP}{TP + FN}$$
由于$TP + FN = P$，所以召回率与灵敏度是一样的。

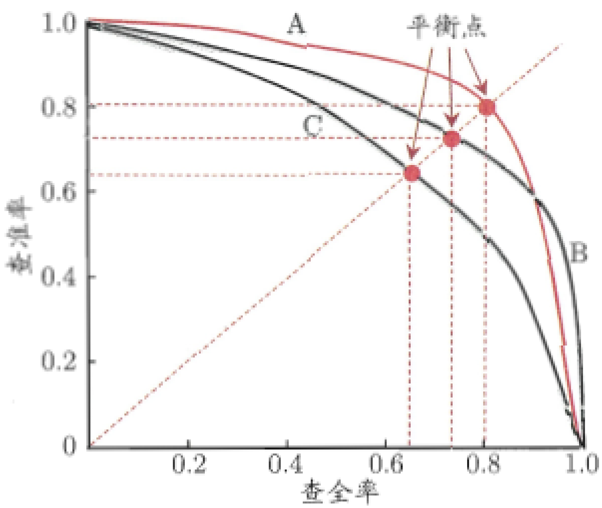
精度和召回率的计算方式图解：



精度和召回率是一对矛盾的度量。一般来说，精度高时，召回率往往偏低；而召回率高时，精度往往偏低。周志华老师的《机器学习》中提到这样一个例子：若希望将好瓜尽可能多选出来，则可通过增加选瓜的数量来实现，如果将所有西瓜都选上，那么所有的好瓜也必然都被选上了，但这样精度就会较低；若希望选出的瓜中好瓜比例尽可能高，则可只挑选最有把握的瓜，但这样就难免会漏掉不少好瓜，使得召回率较低。

5. P-R曲线

在很多情形下，我们可根据学习器的预测结果对样例进行排序（即根据置信度从大到小排序），排在前面的是学习器认为"最可能"是正例的样本，排在最后的则是学习器认为"最不可能"是正例的样本。按此顺序逐个把样本作为正例进行预测，则每次可以计算出当前的精度和召回率。以精度为纵轴，召回率为横轴作图，就得到了"**P-R曲线**"。



（*注：虽然在上图中P-R曲线是平滑的，但这里只是为了美观而画成这样的，现实任务中的P-R曲线是非单调、不平滑的，在很多局部有上下波动。*）

P-R图直观地显示出学习器在样本总体上的精度和召回率。在进行比较时，**若一个学习器的P-R曲线被另一个学习器的曲线完全”包住“，则可断言后者的性能优于前者。**例如在上图中，学习器A的性能优于学习器C。如果两个学习器的P-R曲线发生了交叉，例如上图中的A 和B，则一般难以断言两者孰优孰劣，只能在具体的精度或召回率下进行比较。

为了更加全面的比较精度和召回率的综合性能，人们设计了”**平衡点**“（Break-Event Point，BEP）这一度量，它是”精度=召回率“时的取值。通过基于BEP的比较，可认为学习器A优于B。

6. F1度量

F1度量（F1 Score）是另一个用来综合考虑精度和召回率的度量，它是精度和召回率的调和平均，定义为

$$\frac{1}{F1}=\frac{1}{2}\cdot\left(\frac{1}{P}+\frac{1}{R}\right)$$

整理以后为：

$$F1=\frac{2\times P\times R}{P+R}$$

这里的P指precision，R指recall。

在一些应用中，对精度和召回率的重视程度不同。例如在商品推荐系统中，为了尽可能少打扰用户，更希望推荐内容是用户感兴趣的，此时精度更重要；而在逃犯信息检索中，更希望尽可能少漏掉逃犯，此时召回率更重要。F1度量的一般形式——F_β，能让我们表达出对精度/召回率的不同偏好，它定义为

$$F_\beta=\frac{\left(1+\beta^2\right)\times P\times R}{\left(\beta^2\times P\right)+R}$$

其中$\beta>0$度量了召回率对精度的相对重要性。$\beta=1$时退化为标准的F1；$\beta>1$时召回率有更大影响；$\beta<1$时精度有更大影响。

很多时候我们有多个二分类混淆矩阵，例如进行多次训练/测试，每次得到一个混淆矩阵；或者是在多个数据集上进行训练/测试，希望估计算法的”全局“性能；甚至是执行多分类任务，每两两类别的组合都对应一个混淆矩阵；......总之，我们希望在n个二分类混淆矩阵上综合考虑精度和召回率。

一种直接的做法是先在各混淆矩阵上分别计算出精度和召回率，记为$(P_1,R_1),(P_2,R_2),\ldots,(P_n,R_n)$，再计算平均值，这样就得到”宏精度“（macro-P）、”宏召回率“（macro-R），以及对应的”宏F1“（macro-F1）：

$$\text{macro -}P=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}P_i$$

$$\text{macro - }R=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}R_i$$

$$\text{macro - }F1=\frac{2\times\ \text{macro - }P\times\ \text{macro - }R}{\text{macro - }P+\ \text{macro - }R}$$

还可先将各混淆矩阵的对应元素进行平均，得到TP、FP、TN、FN的平均值，分别记为$\overline{TP}$、$\overline{FP}$、$\overline{TN}$、$\overline{FN}$，再基于这些平均值计算出”微精度“（micro-P）、”微召回率“（micro-R）和”微F1“（micro-F1）：

$$\text{micro-}P=\frac{\overline{TP}}{\overline{TP}+\overline{FP}}$$

$$\text{micro-}R=\frac{\overline{TP}}{\overline{TP}+\overline{FN}}$$

$$\text{micro-}F1=\frac{2\times\text{micro-}P\times\text{micro-}R}{\text{micro-}P+\text{micro-}R}$$

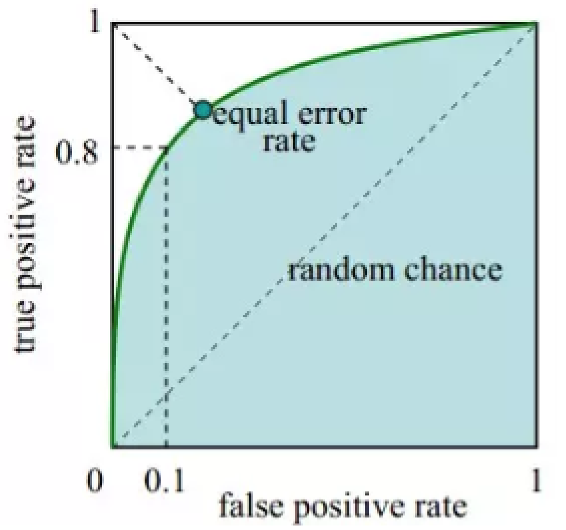
7. ROC曲线

ROC曲线全称”受试者工作特征“（Receiver Operating Characteristic）曲线。ROC曲线的纵轴是”真正例率“（True Positive Rate，简称TPR），即sensitivity或recall；横轴是”假正例率“（False Positive Rate，简称FPR），即1-specificity，两者定义为

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

$$\text{FPR}=\frac{FP}{TN+FP}$$

绘制ROC曲线时，我们根据预测结果的置信度得分从大到小排序，选取合适的阈值，每次将一个样本划分为正例，可以得到一组（FPR，TPR），将所有的（FPR，TPR）坐标点连接起来，即可得到ROC曲线。



阈值选取最大时，所有样本都被划分为负例，此时不管是真正例和假正例数目都为0，对应坐标点为（0，0）；随着阈值的逐渐减小，越来越多的样本被划分为正例，但同时这些正例中也掺杂这假正例，即TPR和FPR会同时增大；当阈值选取最小时，所有样本都被划分为正例，即原本是正例的样本被划分为正例，原本是负例的样本也被划分为正例，所以TPR和FPR都为1，对应坐标（1，1）。

ROC曲线中，45度角的斜对角线对应随机猜测的结果。对于一个分类器来说，其ROC曲线应位于45度斜线之上，否则分类就没有意义。进行模型比较时，与P-R曲线类似，如果一个分类器的ROC曲线被另一个分类器的曲线完全”包住“，则可断言后者的性能优于前者；若两个分类器的ROC曲线发生交叉，则无法判断，此时要借助另一个指标——AUC（见下文）。

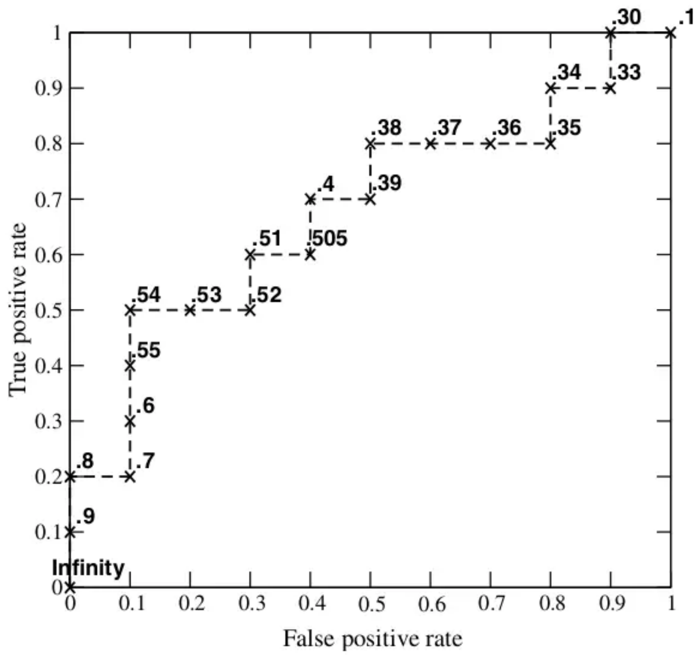
理想情况下，我们希望TPR=1，FPR=0，即图中（0，1）点，故ROC曲线越靠近（0，1）点，越偏离45度对角线越好，对应Sensitivity、Specificity越大效果越好。

- **一个绘制ROC曲线的例子**

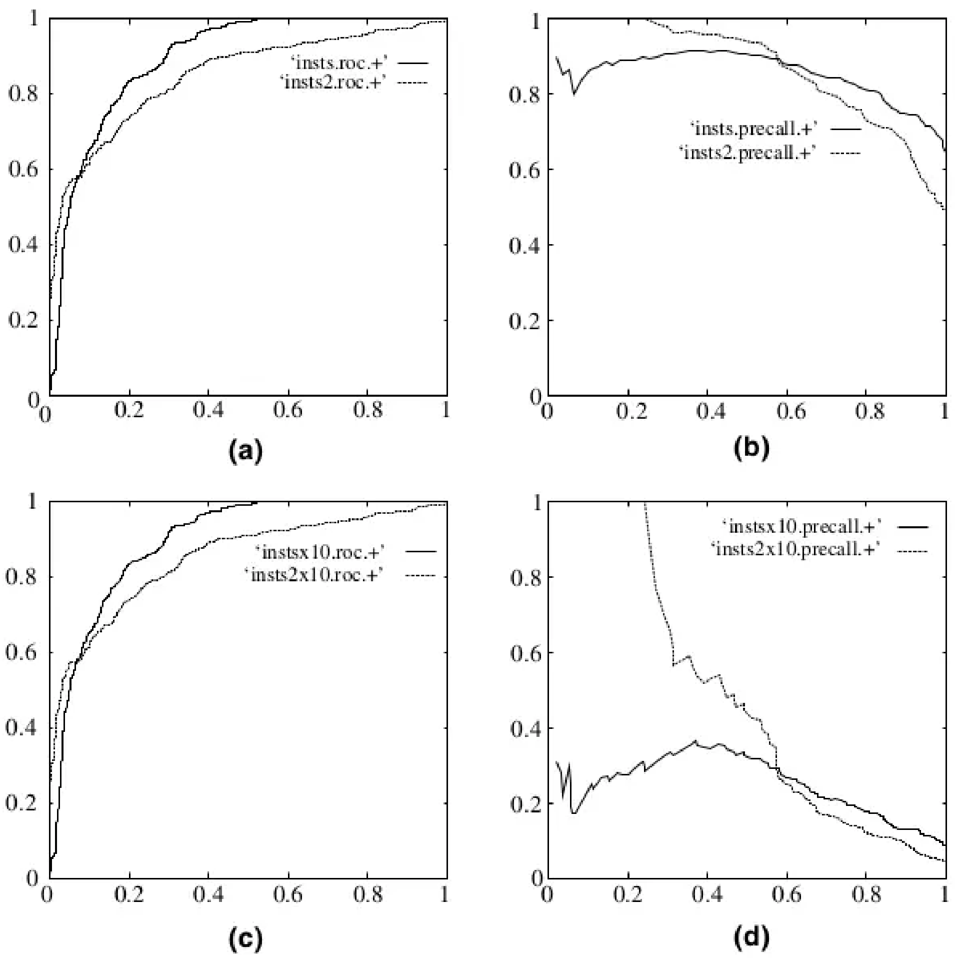
  以20个样本为例，其类别标签和输出概率得分如下：

Inst#	Class	Score	Inst#	Class	Score
1	**p**	.9	11	**p**	.4
2	**p**	.8	12	**n**	.39
3	**n**	.7	13	**p**	.38
4	**p**	.6	14	**n**	.37
5	**p**	.55	15	**n**	.36
6	**p**	.54	16	**n**	.35
7	**n**	.53	17	**p**	.34
8	**n**	.52	18	**n**	.33
9	**p**	.51	19	**p**	.30
10	**n**	.505	20	**n**	.1

  接下来，我们从高到低，依次将“Score”值作为阈值threshold，当测试样本属于正样本的概率大于或等于这个threshold时，我们认为它为正样本，否则为负样本。举例来说，对于图中的第4个样本，其“Score”值为0.6，那么样本1，2，3，4都被认为是正样本，因为它们的“Score”值都大于等于0.6，而其他样本则都认为是负样本。每次选取一个不同的threshold，我们就可以得到一组FPR和TPR，即ROC曲线上的一点。这样一来，我们一共得到了20组FPR和TPR的值，将它们画在ROC曲线的结果如下图：



ROC曲线有个很好的特性：当测试集中的正负样本的分布变化的时候，ROC曲线能够保持不变。在实际的数据集中经常会出现类不平衡（class imbalance）现象，即负样本比正样本多很多（或者相反），而且测试数据中的正负样本的分布也可能随着时间变化。下图是ROC曲线和Precision-Recall曲线的对比：



在上图中，(a)和(c)为ROC曲线，(b)和(d)为Precision-Recall曲线。(a)和(b)展示的是分类其在原始测试集（正负样本分布平衡）的结果，(c)和(d)是将测试集中负样本的数量增加到原来的10倍后，分类器的结果。可以明显的看出，ROC曲线基本保持原貌，而Precision-Recall曲线则变化较大。

8. AUC

AUC（Area Under ROC Curve） 被定义为ROC曲线下的面积，显然这个面积的数值不会大于1。又由于ROC曲线一般都处于y=x这条直线的上方，所以AUC的取值范围一般在0.5和1之间。使用AUC值作为评价标准是因为很多时候ROC曲线并不能清晰的说明哪个分类器的效果更好，而作为一个数值，对应AUC更大的分类器效果更好。

AUC值的含义：AUC值是一个概率值，当随机挑选一个正样本以及一个负样本，当前的分类算法根据计算得到的Score值**将这个正样本排在负样本前面的概率就是AUC值**。当然，AUC值越大，当前的分类算法越有可能将正样本排在负样本前面，即能够更好的分类。

从AUC判断分类器（预测模型）优劣的标准：

- AUC = 1，是完美分类器，采用这个预测模型时，存在至少一个阈值能得出完美预测。绝大多数预测的场合，不存在完美分类器。
- 0.5 < AUC < 1，优于随机猜测。这个分类器（模型）妥善设定阈值的话，能有预测价值。
- AUC = 0.5，跟随机猜测一样（例：丢铜板），模型没有预测价值。

- AUC < 0.5，比随机猜测还差；但只要总是反预测而行，就优于随机猜测。

简单说：**AUC值越大的分类器，正确率越高。**

AUC的计算：早期文献中是直接通过几何方法计算ROC曲线下的面积来得到AUC值，但是用这种方法计算比较麻烦，所以这里我们介绍两种其他方法：

- 直接根据概率计算：根据AUC的含义我们知道，AUC就是预测得到正样本的概率大于负样本概率的概率。我们可以直接根据这个性质来计算AUC。具体来讲，在有M个正样本，N个负样本的数据集里，一共有$M*N$对样本（一对样本即，一个正样本与一个负样本）。统计这$M*N$对样本里，正样本的预测概率大于负样本的预测概率的个数，即

$$\frac{\sum I(P_{\text{positive}}, P_{\text{negative}})}{M \times N}$$

其中

$$I(P_{\text{positive}}, P_{\text{negative}}) = \begin{cases} 1, & P_{\text{positive}} > P_{\text{negative}} \\ 0.5, & P_{\text{positive}} = P_{\text{negative}} \\ 0, & P_{\text{positive}} < P_{\text{negative}} \end{cases}$$

举个例子说明一下：

ID	label	pro
A	0	0.1
B	0	0.4
C	1	0.35
D	1	0.8

假设有4条样本。2个正样本，2个负样本，那么M*N=4。即总共有4个样本对。分别是：（D,B），（D,A）,(C,B),（C,A）。在（D,B）样本对中，正样本D预测的概率大于负样本B预测的概率（也就是D的得分比B高），记为1；同理，对于（C,B）。正样本C预测的概率小于负样本C预测的概率，记为0。最后可以算得，总共有3个符合正样本得分高于负样本得分，故最后的AUC为

$$\frac{1+1+1+0}{4} = 0.75$$

假如出现得分一致的时候，例如：

ID	label	pro
A	0	0.1
B	0	0.4
C	1	0.4
D	1	0.8

同样本是4个样本对，对于样本对（C,B）其I值为0.5。最后的AUC为

$$\frac{1+1+1+0.5}{4} = 0.875$$

- 利用公式计算：首先根据score从大到小排序，令最大score对应的样本的rank为n（n代表总样本数），第二大score对应的样本的rank为$n-1$，以此类推。那么我们可以根据这个公式来计算AUC值：

$$AUC = \frac{\sum_{ins_i \in \text{positiveclass}} rank_{ins_i} - \frac{M \times (M+1)}{2}}{M \times N}$$

其中rank_{ins_i}代表的就是第i个样本的序号，M，N分别是正样本和负样本的个数，$\sum_{ins_i \in \text{positiveclass}}$代表只把正样本的序号加起来。

怎么理解这个公式呢？如果我们假设所有的正样本score值都是大于负样本的，那么第一位与任意的进行组合score值都要大，我们取它的rank值为n，但是$n-1$中有$M-1$是正样例和正样例的组合这种是不在统计范围内的（为计算方便我们取n组，相应的不符合的有M个），所以要减掉，那么同理排在第二位的$n-1$，会有$M-1$个是不满足的，依次类推，故得到后面的公式$M*(M+1)/2$。所以我们不难看出，rank的值代表的是能够产生score前大后小的这样的组合数，但是这里包含了（正，正）的情况，所以要减去这样的组（即排在它后面正例的个数），即可得到上面的公式。

接下来依然是举例子环节：

ID	label	pro
A	0	0.1
B	0	0.4
C	1	0.35
D	1	0.8

将这个例子排序。按概率排序后得到：

ID	label	pro	rank
A	0	0.1	1
C	1	0.35	2
B	0	0.4	3
D	1	0.8	4

接下来代入公式即可

$$\frac{(4+2) - \frac{2*(2+1)}{2}}{2*2} = \frac{6-3}{4} = 0.75$$

AUC的值即为0.75。

假如出现得分一致的情况怎么办？下面举一个例子说明：

ID	label	pro
A	1	0.8
B	1	0.7
C	0	0.5
D	0	0.5
E	1	0.5
F	1	0.5
G	0	0.3

在这个例子中，我们有4个取值概率为0.5，而且既有正样本也有负样本的情况。计算的时候，其实原则就是相等得分的rank取平均值。具体来说如下：

先排序：

ID	label	pro	rank
G	0	0.3	1
F	1	0.5	2
E	1	0.5	3
D	0	0.5	4
C	0	0.5	5
B	1	0.7	6
A	1	0.8	7

这里需要注意的是：相等概率得分的样本，无论正负，谁在前，谁在后无所谓。

由于只考虑正样本的rank值：

对于正样本A，其rank值为7

对于正样本B，其rank值为6

对于正样本E，其rank值为（5+4+3+2）/4

对于正样本F，其rank值为（5+4+3+2）/4

最后我们得到：

$$\frac{7+6+\frac{(5+4+3+2)}{4}+\frac{(5+4+3+2)}{4}-\frac{4*(4+1)}{2}}{4*3}=\frac{10}{12}$$