PR-curve, ROC-curve, cost-curve

Полина Святокум

19 декабря 2016 г.

Overview

- Что нельзя понять по ROC-кривым
 - ROC-кривая и cost-кривая
 - Визуальная оценка кривых
 - Другие преимущества cost-кривых
- Сходства и отличия PR-кривых и ROC-кривых
 - PR-кривая и когда она лучше ROC-кривой
 - Выпуклая оболочка и достижимая PR-кривая
 - Построение достижимой РК-кривой
 - AUC-ROC и AUC-PR

Постановка задачи и ROC-кривая

Будем рассматривать задачу бинарной классификации. Для оценки качества алгоритмов часто используют ROC-кривую (в частности, площадь под кривой).

ROC-пространство это плоскость с x-координатой отвечающей за FP rate и y-координатой отвечающей за TP rate.

Одна матрица ошибок порождает одну точку в этом пространстве. ROC-кривая получается при соединении ROC-точек алгоритма и (0,0),(1,1)

PCF(+) и cost-кривая

Мы хотим уметь оценивать качество алгоритма в зависимости от штрафов за неправильную классификацию. С этой целью вводим следующую функцию

$$PCF(+) = \frac{p(+)C(-|+)}{p(+)C(-|+) + p(-)C(+|-)}$$

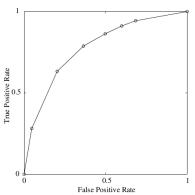
Cost-пространством является плоскость с x-координатой отвечающей за PCF(+) и y-координатой отвечающей за нормализованную ожидаемую cost error алгоритма.

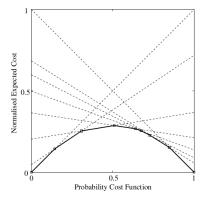
При C(-|+) = C(+|-) по оси х будет отложена вероятность появления положительного класса, по оси у будет отложена относительная ошибка классификации.

Связь ROC-кривых и cost-кривых

Каждая точка ROC-пространства соответствует прямой в cost-пространстве, и каждой прямой ROC-пространства соответствует точка в cost-пространстве.

Точке (FP, TP) из ROC-пространства соответствует прямая, проходящая через точки (0, FP), (1, 1 - TP), из cost-пространства.



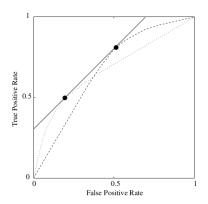


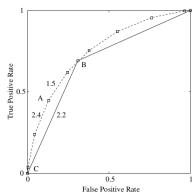
Минусы ROC-кривой

- ROC-кривую сложно связать с конкретным способом оценки качества классификации
- По ROC-кривой сложно сравнить алгоритм с константным предсказанием

Минусы ROC-кривой

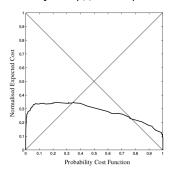
- По ROC-кривым сложно понять при каких начальных условиях один алгоритм превосходит другой.
- По ROC-кривым сложно понять насколько один алгоритм превосходит другой (при разных параметрах нужно сравнивать разные точки)

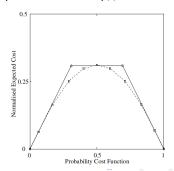




Как это сделать с помощью cost-кривых

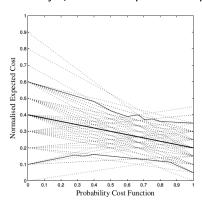
- Оценить качество алгоритма при различных начальных параметрах можно посмотрев на точку с соответствующей х-координатой
- Константные предсказания в cost-пространстве описываются диагоналями единичного квадрата
- В cost-пространстве можно оценивать норму разности у-координат при каждой фиксированной х-координате

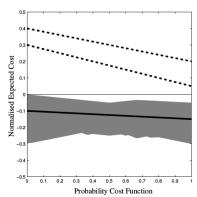




Другие преимущества cost-кривых

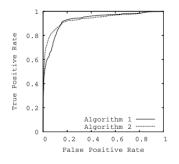
- Cost-кривые можно адекватно усреднить
- С помощью cost-кривых и бустрапа можно строить доверительные интервалы
- С помощью cost-кривых можно проверять гипотезу о существенном различии работы двух алгоритмов



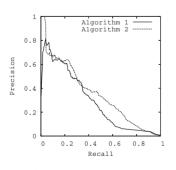


PR-кривая

PR-пространство это плоскость с х-координатой отвечающей за Recall(TP rate) и у-координатой отвечающей за Precision. Обычно сравнение сильно смещенных данных лучше проводить именно с помощью PR-кривой.



(a) Comparison in ROC space



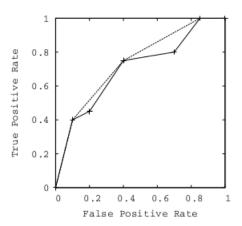
(b) Comparison in PR space

связь PR-кривой и ROC-кривой

- Если Recall не равен 0, то по PR-точке можно однозначно восстановить матрицу ошибок. Следовательно, можно построить соответствующую ROC-точку. Обратное также верно. Потому между PR-кривыми и ROC-кривыми можно установить взаимно однозначное соответствие (при фиксированном наборе данных).
- На фиксированном наборе данных первая PR-кривая доминирует вторую тогда и только тогда, когда соответствующая первой ROC-кривая доминирует ROC-кривую соответствующую второй.

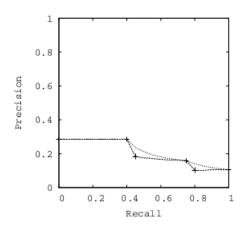
Выпуклая оболочка ROC-кривой

- Между соседними точками используется линейная интерполяция
- Точки не лежат выше финальной кривой
- Для любых двух точек финальной кривой отрезок, который их соединяет, не лежит выше кривой



Достижимая PR-кривая

- Достижимая PR-кривая доминирует все остальные валидные PR-кривые, которые могут быть построены на этих точках
- Может быть построена как двойственная к выпуклой оболочке ROC-кривой



Интерполяция между соседними точками

- Линейная интерполяция между соседними точками PR-кривой нехороша по нескольким причинам. Во-первых, мы увеличиваем AUC-PR, во-вторых, мы получаем не двойственную к выпуклой оболочке ROC-кривой кривую.
- Для интерполяции применима следующая формула Если $(FP_A, TP_A), (FP_B, TP_B)$ – точки из ROC-пространства, то в PR-пространстве мы их соединим кривой состоящей из точек

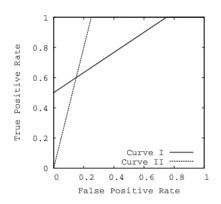
$$(\frac{TP_A + x}{TotalPos}, \frac{TP_A + x}{TP_A + x + FP_A + \frac{FP_B - FP_A}{TP_B - TP_A}x}), 1 \le x \le TP_B - TP_A$$

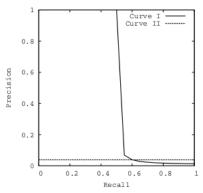
Алгоритм построения достижимой PR-кривой

- Рассмотреть двойственные точки в пространстве ROC
- Построить их выпуклую оболочку
- Рассмотреть двойственные точки к выпуклой оболчке в пространстве PR
- Провести интерполяцию между соседними точками

AUC-ROC и AUC-PR

- Алгоритмы, которые максимизируют AUC-ROC не всегда максимизируют AUC-PR
- Для сильно смещенных наборов данных классификаторы, максимизирующие AUC-ROC могут работать плохо





Ну как-то так