Описание того, что мне известно о показателе GINI (в задаче классификации)

GINI метрика используемая для определения качества классификационной модели.

In [1]:
```
import pandas as pd
import numpy as np

from sklearn.metrics import roc_curve, auc

import matplotlib.pyplot as plt

from statsmodels.distributions.empirical_distribution import ECDF
np.random.seed(10)
```

Сдержание:

Базовое определение GINI

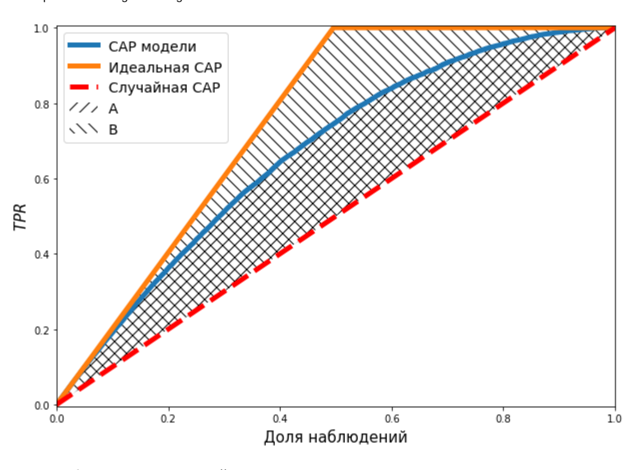
Обычно GINI определяют через CAP кривую.
GINI для некоторой модели, это отношение площадей между CAP кривой модели и случайной CAP кривой к площади между идеальной CAP и случайной CAP.

Покажем на рисунке:

In [2]:
```
plot_ss = 10000

np.random.seed(3)
random_range = np.random.rand(plot_ss)

plot_data = pd.DataFrame({
    "p_hat" : random_range,
    "y" : map(
        lambda r_val: np.random.choice(
            [0, 1], p = [1 - r_val, r_val]
        ),
        random_range
    )
})

plot_data.sort_values("y",inplace = True, ascending = False)
plot_data["p_hat_ideal"] = np.linspace(1,0, plot_data.shape[0])


fpr, or_tpr, t = roc_curve(
    plot_data["y"], plot_data["p_hat"],
    drop_intermediate = False
)
fpr, id_tpr, t = roc_curve(
    plot_data["y"], plot_data["p_hat_ideal"],
    drop_intermediate = False
)

CAP_x = np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr)
```

In [3]:
```
plt.figure(figsize = [10,7])
plt.plot(CAP_x, or_tpr, linewidth = 5)
plt.plot(CAP_x, id_tpr, linewidth = 5)
plt.plot(
    [0,1], [0,1], color = "red",
    linestyle = "dashed",
    linewidth = 5
)

plt.fill_between(
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    or_tpr,
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    hatch = "//",
    alpha = 0
)
plt.fill_between(
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    id_tpr,
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    hatch = "\\\\",
    alpha = 0
)

plt.xlabel("Доля наблюдений", fontsize = 15)
plt.ylabel("$TPR$", fontsize = 15)

plt.xlim([0,1])
plt.ylim([-0.005,1.005])

plt.legend(
    [
        "CAP модели", "Идеальная CAP",
        "Случайная CAP", "A", "B"
    ],
    fontsize = 14
)
```

Out[3]:
```
<matplotlib.legend.Legend at 0x7ff53d4a7fa0>
```

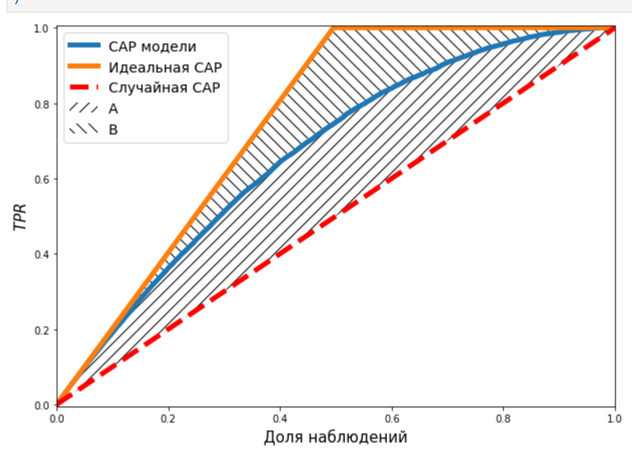


Следуя обозначениям площадей на рисунке, получаем:

$$GINI = \frac{A}{B}$$

Или испозуя альтернативное обозначение площадей (по, пока, незвенстной причине особенно популярное)

In [4]:
```
plt.figure(figsize = [10,7])
plt.plot(CAP_x, or_tpr, linewidth = 5)
plt.plot(CAP_x, id_tpr, linewidth = 5)
plt.plot(
    [0,1], [0,1], color = "red",
    linestyle = "dashed",
    linewidth = 5
)

plt.fill_between(
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    or_tpr,
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    hatch = "//",
    alpha = 0
)
plt.fill_between(
    np.arange(len(or_tpr))/len(or_tpr),
    id_tpr,
    or_tpr,
    hatch = "\\\\",
    alpha = 0
)

plt.xlabel("Доля наблюдений", fontsize = 15)
plt.ylabel("$TPR$", fontsize = 15)

plt.xlim([0,1])
plt.ylim([-0.005,1.005])

ans = plt.legend(
    [
        "CAP модели", "Идеальная CAP",
        "Случайная CAP", "A", "B"
    ],
    fontsize = 14
)
```



$$GINI = \frac{A}{B + A}$$

Связь GINI с ROC

Есть альтернативный способ подсчитать $GINI$ - через ROC кривую.

Аналитическое доказательсво

В качесве примера возьмем таблицу которую использовали при рассмотрении CAP кривой. Каждое полученное тождество буду сверять с этим примером, для того, что-бы быть уверенным, в том, что в процессе не допущено ошибок.

i	$\hat{p}_i$	y_i	i/n	TPR_i	FPR_i
1	0.8	1	0.2	1/3	0
2	0.7	1	0.4	2/3	0
3	0.6	0	0.6	2/3	1/2
4	0.4	0	0.8	2/3	1
5	0.2	1	1	1	1

Сразу обозначим, что $FPR_0 = TPR_0 = 0$.

Все массивы примера, что на м понадобиться, загоняем в память компьютера.

In [5]:
```
n = 5
TPR = np.array([0, 1/3, 2/3, 2/3, 2/3, 1])
FPR = np.array([0, 0, 0, 1/2, 1, 1])
i = np.arange(6)
y = np.array([1,1,0,0,1])
```

Запишем площадь под ROC кривой, что и будет показателем AUC_{roc}:

$$AUC_{roc} = \sum_{i=0}^{n-1}(FPR_{i+1} - FPR_i)(TPR_{i+1} + TPR_i)/2. \tag{1}$$

$GINI$ от сюда выражается:

$$GINI = 2AUC_{roc} - 1. \tag{2}$$

In [6]:
```
auc_roc = np.sum((FPR[1:] - FPR[:-1])*(TPR[1:] + TPR[:-1])/2)
2*auc_roc - 1
```

Out[6]:
```
0.33333333333333326
```

Запишем площадь под дейсвтительной CAP кривой:

$$AUC_{cap} = \sum_{i=0}^{n-1}([i+1]/n - i/n)(TPR_{i+1} + TPR_i)/2 = \sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n.$$

Тогда площадь между случайной CAP кривой и действительной CAP кривой будет выражаться так:

$$AUC'_{cap} = \sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n - 0.5. \tag{3}$$

Подсчитаем эту величину, для нашего примера:

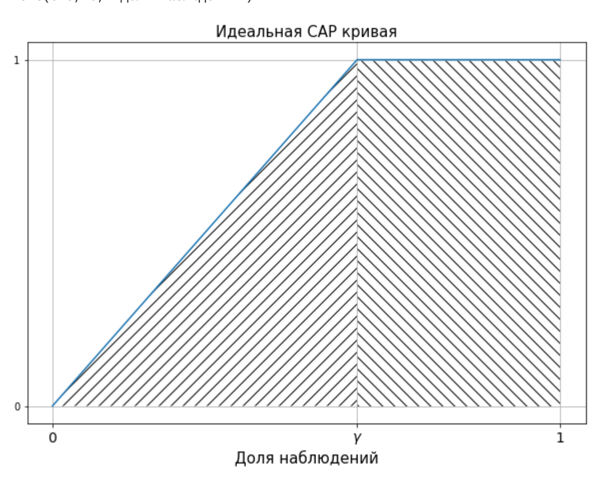
In [7]:
```
AUC_cap = sum((i[1:]/n - i[:-1]/n)*(TPR[1:] + TPR[:-1])/2) - 0.5
AUC_cap
```

Out[7]:
```
0.06666666666666654
```

К записи **площади под идеальной CAP** кривой лучше подойти с геометрической точки зрения:

In [8]:
```
y_rel_ideal = [0, 1/3, 2/3, 1, 1, 1]
x_rel = [i/5 for i in range(6)]

plt.figure(figsize = [10, 7])

plt.plot(x_rel, y_rel_ideal)
plt.fill_between(
    [0, 0.6], [0, 1], [0,0],
    alpha = 0, hatch = "//"
)
plt.fill_between(
    [0.6, 1], [0, 0], [1,1],
    alpha = 0, hatch = "\\\\"
)

plt.yticks([0, 1])
plt.xticks(
    [0, 0.6, 1],
    ["0", "$\gamma$", "1"],
    fontsize = 14
)

plt.title(
    "Идеальная CAP кривая",
    fontsize = 15
)

plt.grid()
plt.xlabel("Доля наблюдений", fontsize = 15)
```

Out[8]:
```
Text(0.5, 0, 'Доля наблюдений')
```



Где γ - доля наблюдений с проявлением признака:

$$\gamma = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}.$$

Эта площадь раскладывается на 2 фигуры:

- Треугольник, выделенный штриховкой наклоненной влево;
- Прямоугольник, выделейнный штрифовной наклоненной вправо.

Очевидно такую площадь можно записать:

$$AUC^I = \gamma/2 + (1 - \gamma) = 1 - \gamma/2.$$

Тогда площадь между идеальной CAP кривой и случайной CAP кривой составит:

$$AUC'^I = 1 + \gamma/2 - 0.5 = 0.5 - \gamma/2.$$

Или подставляя γ:

$$AUC'^I = 0.5 - \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{2n}. \tag{4}$$

Подсчитаем значение, принимаемое данной величиной, для нашего примера:

In [9]:
```
AUC_I = 0.5-sum(y)/(2*n)
AUC_I
```

Out[9]:
```
0.2
```

Тогда $GINI$ через CAP кривую:

$$GINI = \frac{AUC'_{cap}}{AUC'^I}. \tag{5}$$

Убедимся, что он совпадает с числом полученным через ROC:

In [10]:
```
AUC_cap/AUC_I
```

Out[10]:
```
0.3333333333333327
```

И так, **для доказательства нам следуем показать** равенство выражений $(2), (5)$, подставив туда $(1), (3), (4)$ или:

$$2AUC_{roc} - 1 = \frac{AUC'_{cap}}{AUC'^I} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow 2\left[\sum_{i=0}^{n-1}(FPR_{i+1} - FPR_i)(TPR_{i+1} + TPR_i)/2\right] - 1 = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} - \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{2n}} \Leftrightarrow \tag{6}$$

$$\Leftrightarrow \left[\sum_{i=0}^{n-1}(FPR_{i+1} - FPR_i)(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - 1 = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} - \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{2n}}$$

Будем работать с правой частью тождества:

$$\frac{\sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n - \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} - \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{2n}} =$$

$$= \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)/2n - \frac{1}{2}}{\frac{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}{2n}} =$$

$$= \frac{\left[\sum_{i=0}^{n-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} =$$

$$= \left[\sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} \tag{7}$$

Убедимся на числах, что проделанные пребразования корректны.

In [11]:
```
(sum(TPR[1:] + TPR[:-1])-n)/(n-sum(y))
```

Out[11]:
```
0.33333333333333304
```

Будем работать с левой частью тождества:

$$\left[\sum_{i=0}^{n-1}(FPR_{i+1} - FPR_i)(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - 1 \tag{8}$$

Обсудим свойсва выражения:

$$(FPR_{i+1} - FPR_i)$$

FPR (доля ложно положительных предсказаний) прирастает только для предсказаний без проявления признака. А, для наблюдения без проявления признака, прирастает на долю, которую занимает одно наблюдение без проявления признка:

$$(FPR_{i+1} - FPR_i) = \begin{cases} 0, y_i = 1; \\ \frac{1}{n - \sum_i^n y_i}, y_i = 0. \end{cases}$$

Где $n - \sum_i^n y_i$ - число наблюдений без проявления признака, тогда:

$$\frac{1}{n - \sum_i^n y_i}$$

доля в одного наблюдения в наблюдениях с проявлением признака.

Тогда выражение (8) может быть переписано следующим образом:

$$\left[\sum_{i|y_{i+1}=0} \frac{1}{\sum_{i=1}^{n} n - y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - 1 \tag{9}$$

То есть суммирование можно произвести только для членов, для которых $y_{i+1} = 0$, все остальные будут равняться нулю. При том в не нулевых членнах один из множителей - константа относительно оператора суммирования.

Убедимся, что проделанные преобразования корректны:

In [12]:
```
np.sum(
    (1/(n - sum(y)))*\
    (TPR[1:][y==0] + TPR[:-1][y==0])
) - 1
```

Out[12]:
```
0.33333333333333326
```

Теперь допустим, что тождество (6) верно. Тогда, учитвая во внимание, последние результаты $(7), (9)$:

$$\left[\sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} = \left[\sum_{i|y_{i+1}=0}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - 1 \Leftrightarrow \tag{10}$$

$$\Leftrightarrow \left[\sum_{i=0}^{n-1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \left[\sum_{i|y_{i+1}=0}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} + 1 = 0$$

Обратите внимание на выражения в квадратных скобках - они полностью совпадают, отличается лишь число компонент суммирования, т.е. после вычитания остануться только те компоненты которых нет в вычитаемом:

$$\left[\sum_{i|y_{i+1}=1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} + 1 = 0$$

Убедисмя, что представленное равенстно верно:

In [13]:
```
sum(
   (1/(n-sum(y)))*(TPR[1:][y==1] + TPR[:-1][y==1])
) -\
n/(n-sum(y)) + 1
```

Out[13]:
```
0.0
```

Далее можно провести рад преобразований над полученным выражением:

$$\left[\sum_{i|y_{i+1}=1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{n}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} + 1 = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \left[\sum_{i|y_{i+1}=1}\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i} = 0 \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}\left\{\left[\sum_{i|y_{i+1}=1}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \sum_{i=1}^{n} y_i\right\} = 0$$

Учитывая, что выражение $\frac{1}{n - \sum_{i=1}^{n} y_i}$ не отрицательное. То для выполнения последнего тождества необходимо, чтобы:

$$\left[\sum_{i|y_{i+1}=1}(TPR_{i+1} + TPR_i)\right] - \sum_{i=1}^{n} y_i = 0 \tag{11}$$

Рассмотрим сумму в квадратных скобрах:

$$\sum_{i|y_{i+1}=1}(TPR_{i+1} + TPR_i)$$

Перепишем её проще, но держа в памяти, что суммирование проводится только по наблюдениям с проявлением признака:

$$\sum_{i=0}^{m-1}(TPR_{i+1} + TPR_i)$$

Где $m = \sum_{i=1}^{n} y_i$.

Теперь вспомним, что TPR это доля клиентов, с проявлением, признака для которых было предсказано проявление признака. Получается, что для каждого клиента с проявлением признака TPR возрастает на $\frac{1}{m}$. Тогда в данной сумме. можно записать, что:

$$\sum_{i=0}^{m-1}\left(\frac{i+1}{m} + \frac{i}{m}\right) = \sum_{i=0}^{m-1}\left(\frac{2i+1}{m}\right)$$

Возвращаясь к тождеству (10) и используя нововведенные обозначения:

$$\sum_{i=0}^{m-1}\left(\frac{2i+1}{m}\right) = m \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = m^2 \tag{12}$$

Доказав это пождество мы докажем, что выполняется вся цепочка тождеств выше. Есть уже очень похожее доказательство, представленное тут. Но мы его приведдем для нашего примера:

Распишем выражение:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = 1 + 3 + 5 + \ldots + 2(m-1) + 1.$$

Тут не хватает четных чисел в суммации добавим и отнимем их:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = \{1 + 3 + 5 + \ldots + [2(m-1) + 1]\} + \{2 + 4 + 6 + \ldots + 2(m-1)\} - \{2 + 4 + 6 + \ldots + 2(m-1)\}.$$

Объединим и упрядочим компоненты первых и вторых фигурных скобок и вынесем 2 из вторых:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = \{1 + 2 + 3 + 4 + \ldots + 2(m-1) + [2(m-1) + 1]\} - 2\{1 + 2 + 3 + \ldots + (m-1)\}.$$

Возвращаясь к алгебре суммирования получаем:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = \left[\sum_{i=1}^{2(m-1)+1} i\right] - 2\left[\sum_{i=1}^{m-1} i\right]. \tag{13}$$

Далее надо выразить:

$$\sum_{i=1}^{\nu} i.$$

Тут можно найти, что:

$$2\sum_{i=1}^{\nu} i = \sum_{i=1}^{\nu} i + \sum_{i=1}^{\nu} i = [1 + 2 + \ldots + (\nu - 1) + \nu] + [\nu + (\nu - 1) + \ldots + 2 + 1] =$$

$$= (\nu + 1) + (\nu - 1 + 2) + \ldots + (2 + \nu - 1) + (\nu + 1) =$$

$$= (\nu + 1) + (\nu + 1) + \ldots + (\nu + 1) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n}(\nu + 1) = \nu(\nu + 1)$$

И так:

$$2\sum_{i=1}^{\nu} i = \nu(\nu + 1) \Leftrightarrow \sum_{i=1}^{\nu} i = \frac{\nu(\nu + 1)}{2}$$

Тогда, возвращаясь к (13) получаем:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 =$$

$$= \frac{[2(m-1) + 1]([2(m-1) + 1] + 1)}{2} - 2\frac{[m-1]([m-1] + 1)}{2} =.$$

$$= \frac{2m[2m + 1]}{2} - [m-1]([m-1] + 1) =$$

$$= m[2m + 1] - m[m - 1] =$$

$$= 2m^2 + m - m^2 - m =$$

$$= m^2$$

И так получается, что:

$$\sum_{i=0}^{m-1} 2i + 1 = m^2$$

Таким образом, выполняется тождество (12), получается справедливым (11), за ним (10) и окончательно $(6)\boxtimes$.

Вычислительный экперимент

Предполагается сэмитировать результаты не которого классификатора и подсчитать для него $GINI$ обоими методами, для того, чтобы убедиться, что результат одинаковый.

Эмитация результата модели

In [14]:
```
plot_ss = 10000

np.random.seed(3)
random_range = np.random.rand(plot_ss)

plot_data = pd.DataFrame({
    "p_hat" : random_range,
    "y" : map(
        lambda r_val: np.random.choice(
            [0, 1], p = [1 - r_val, r_val]
        ),
        random_range
    )
})

plot_data.head()
```

Out[14]:

	p_hat	y
0	0.550798	0
1	0.708148	1
2	0.290905	1
3	0.510828	0
4	0.892947	1

Вычисление через ROC

In [15]:
```
# вычисление точек ROC-кривой
fpr, tpr, t = roc_curve(
    plot_data["y"], plot_data["p_hat"],
    drop_intermediate = False
)
# вычисление GINI через площадь точек под
# ROC кривой
2*auc(fpr, tpr) - 1
```

Out[15]:
```
0.6599391056843444
```

Вычисление через CAP

In [17]:
```
plot_data.sort_values("y",inplace = True, ascending = False)
plot_data["p_hat_ideal"] = np.linspace(1,0, plot_data.shape[0])


# вычисление ординат наблюдаемой CAP кривой
_, tpr_real, _= roc_curve(
    plot_data["y"], plot_data["p_hat"],
    drop_intermediate = False
)
# вычисление площади под CAP
ideal_CAP_auc = plot_data["y"].sum()/plot_data.shape[0]/2 + \
(plot_data["y"] == 0).sum()/plot_data.shape[0]
# вычисление ординат случайной CAP
tpr_random = np.linspace(0,1, len(tpr_real))

B = ideal_CAP_auc - 0.5
A = auc(tpr_random, tpr_real) - 0.5
A/B
```

Out[17]:
```
0.6599391056843441
```

Отличие только в последнем знаке и, скорее всего, обусловлено округлением.

(sum(tpr_real[1:] + tpr_real[:-1]) - plot_data.shape[0])/\ (plot_data.shape[0] - plot_data["y"].sum())