Машинное обучение, ФКН ВШЭ
Семинар №5

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:

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

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 $b\left(x_i\right), i = \overline{1, \ell}$, для некоторой выборки $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$ различны. Отсортируем все объекты по возрастанию ответа классификатора: $b\left(x_{(1)}\right) < \cdots < b\left(x_{(\ell)}\right)$. Обозначим истинные ответы на этих объектах

через $y_{(1)}, \ldots, y_{(\ell)}$. Тогда доля дефектных пар записывается как

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

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:

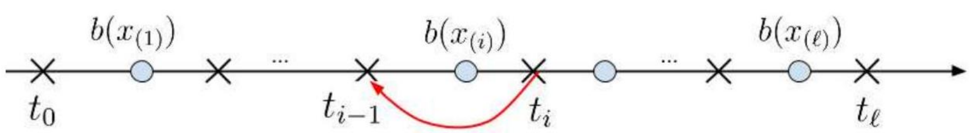
$$t_\ell = b(x_{(\ell)}) + 1,$$
$$t_i = \frac{b(x_{(i)}) + b(x_{(i+1)})}{2},\ i = \overline{1, \ell - 1},$$
$$t_0 = b(x_{(1)}) - 1.$$

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

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

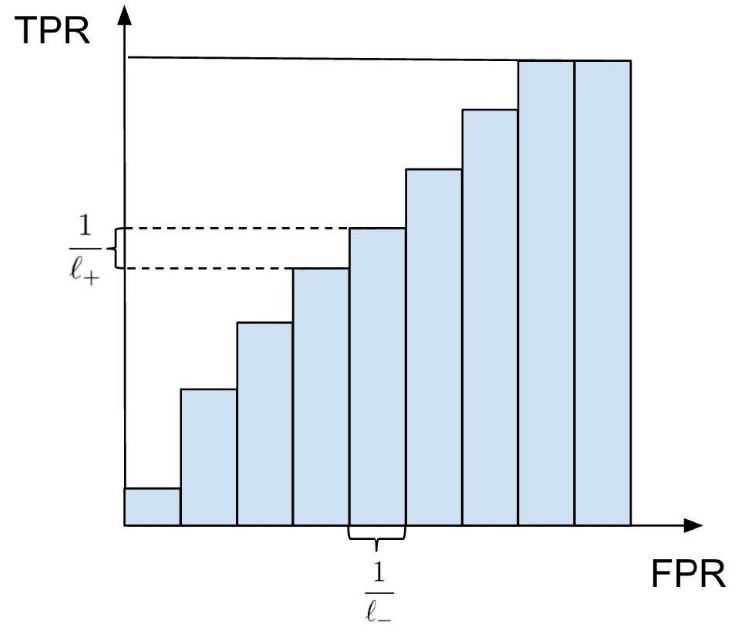
$$\text{TPR} = \frac{\text{TP}}{\ell_+} = \frac{0}{\ell_+} = 0.$$

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:

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

Вычислите AUC - ROC и $PR - ROC$ для 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 $= \frac{2}{3}$.

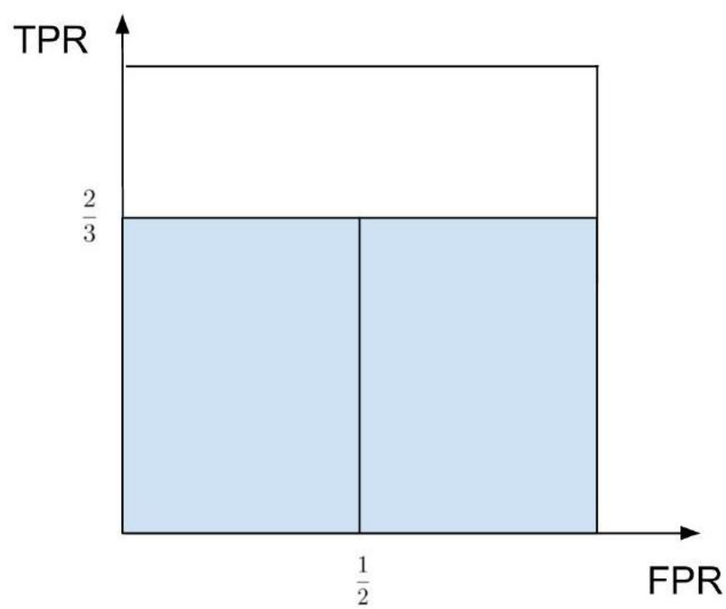


Рис. 1. Иллюстрация к задаче 1.2.

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 $b(x)$ - 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:

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

Отсюда имеем

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

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 1.4. 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.

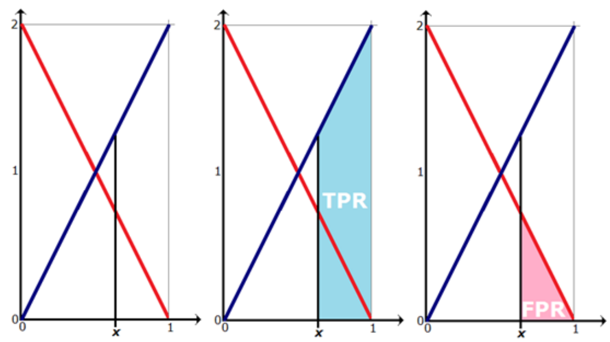


Рис. 2. Распределение объектов положительного и отрицательного классов

Решение. Для выбранного порога бинаризации t значение TPR будет равно отношению площади трапеции, отсекаемой вертикальной прямой $y = t$ под синей прямой (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 $y = 2\sqrt{x} - x$. Площадь под ней можно посчитать, взяв следующий интеграл:

$$\int_0^1 (2\sqrt{x} - x)dx = \left(\frac{4}{3}x^{\frac{3}{2}} - \frac{1}{2}x^2\right)\Big|_0^1 = \frac{5}{6}.$$

Задача 1.5. У банка всего 4000 клиентов. Маркетингового бюджета нового пред- ложения банка хватит на то, чтобы обзвонить 800 клиентов. По историческим дан- ным 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 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. 3.

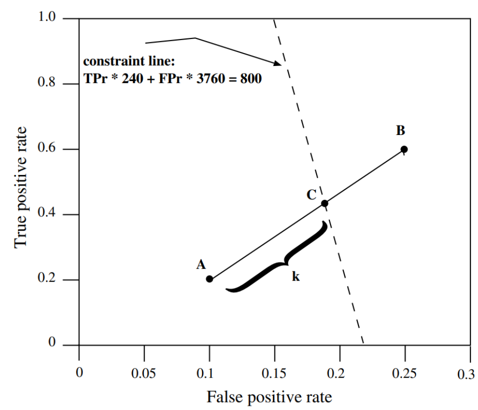


Рис. 3. Иллюстрация к задаче 1.5

Задача 1.6. 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 1.7. Обратимая ли PR-кривая? Рассмотрим бинарный классификатор, который каждой выборке из N объектов сопоставляет оценки $b_i \in [0, 1]$, $i = 1, \ldots, N$. Пусть истинные метки обозначены как $y_i \in \{0, 1\}$. Так же дополнительно известна π - доля положительных примеров в выборке.

Пусть PR-кривая классификатора задана в аналитическом виде, то есть известна точная зависимость $Precision = f(Recall)$.

1. Докажите, что зная функцию $f(Recall)$ и значение π, можно восстановить ROC-кривую (то есть получить зависимость TPR от FPR).
2. Найдите явное выражение для FPR через $Precision$, $Recall$ и π.

Решение: Используя соотношения:

$$Precision = \frac{TP}{TP+FP}, \quad Recall = \frac{TP}{TP+FN}, \quad \pi = \frac{TP+FN}{N}.$$

Можно выразить через эти параметры FP, FN и получить

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

учитывая, что $FP + TN = (1 - \pi)N$.

Ответ.

$$FPR = \frac{\pi\, Recall\, (1 - Precision)}{(1 - \pi)\, Precision}, \qquad TPR = Recall.$$

Комментарий. При известной PR-кривой $Precision(Recall)$ и доле положительных π, ROC-кривая однозначно восстанавливается. Однако без знания π обратное преобразование невозможно, так как ROC-кривая инвариантна к изменению соотношения классов, а PR-кривая — нет.

Прямая оптимизация AUC-ROC

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

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

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.

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

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

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