Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий

к.т.н.,
зав. Лабораторией машинного обучения в науках о Земле МФТИ
с.н.с. Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Задачи классификации
Оценка качества моделей классификации

Михаил Криницкий

к.т.н.,
зав. Лабораторией машинного обучения в науках о Земле МФТИ
с.н.с. Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Самая простая и (чаще всего) неверная мера качества в задачах классификации – доля верных ответов (accuracy)

$$Accuracy(y_{pred}, y_{true}) = \frac{\sum[y_{pred} == y_{true}]}{N}$$

Представим следующую задачу (и решение):
В наборе данных $\mathcal{T}$ 95% объектов – класса A, остальные объекты – классов B,C,D
Мы создали и обучили модель, которая для любого нового объекта выдает результат «это объект класса A»

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Самая простая и (чаще всего) неверная мера качества в задачах классификации – доля верных ответов (accuracy)

$$Accuracy(y_{pred}, y_{true}) = \frac{\sum[y_{pred} == y_{true}]}{N}$$

Представим следующую задачу (и решение):
В наборе данных $\mathcal{T}$ 95% объектов – класса A, остальные объекты – классов B,C,D
Мы создали и обучили модель, которая для любого нового объекта выдает результат «это объект класса A»

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

Ответ: для такой (простой и интуитивно глупой) модели доля верных ответов:

$$Acc = 0{,}95 = 95\%$$

Хорошая ли это мера качества для такой (несбалансированной) выборки?

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Самая простая и (чаще всего) неверная мера качества в задачах классификации – доля верных ответов (accuracy)

$$Accuracy(y_{pred}, y_{true}) = \frac{\sum[y_{pred} == y_{true}]}{N}$$

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний $\mathcal{T}$ 99.5% объектов – класса «здоров», остальные объекты – классов B,C,D (различные виды злокачественных новообразований)

Мы создали и обучили модель, которая обладает очень высокой чувствительностью: не пропускает ни одного случая злокачественного новообразования. Но при этом доля ложноположительных диагнозов довольно высока: 2% диагностируемых пациентов.

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth \ Ответ нашей модели	НЕТ	ДА
НЕТ		
ДА		

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний $\mathcal{T}$ 99.5% объектов – класса «здоров», остальные объекты – классов B,C,D (различные виды злокачественных новообразований)

Мы создали и обучили модель, которая обладает очень высокой чувствительностью: не пропускает ни одного случая злокачественного новообразования. Но при этом доля ложноположительных диагнозов довольно высока: 2% диагностируемых пациентов.

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

		Ответ нашей модели: НЕТ	Ответ нашей модели: ДА	
		НЕТ	ДА	1000
ground truth	НЕТ	975	20	995
	ДА	0	5	5

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний $\mathcal{T}$ 99.5% объектов – класса «здоров», остальные объекты – классов B,C,D (различные виды злокачественных новообразований)

Мы создали и обучили модель, которая обладает очень высокой чувствительностью: не пропускает ни одного случая злокачественного новообразования. Но при этом доля ложноположительных диагнозов довольно высока: 2% диагностируемых пациентов.

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth	Ответ нашей модели: НЕТ	Ответ нашей модели: ДА	1000
НЕТ	975	20	995
ДА	0	5	5

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний $\mathcal{T}$ 99.5% объектов – класса «здоров», остальные объекты – классов B,C,D (различные виды злокачественных новообразований)

Мы создали и обучили модель, которая обладает очень высокой чувствительностью: не пропускает ни одного случая злокачественного новообразования. Но при этом доля ложноположительных диагнозов довольно высока: 2% диагностируемых пациентов.

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

$$Acc = \frac{975 + 5}{1000} = 0.98 = 98\%$$

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

		Ответ нашей модели: НЕТ	Ответ нашей модели: ДА	
ground truth	НЕТ	TN	FP	995
	ДА	FN	TP	5
		НЕТ	ДА	1000

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний $\mathcal{T}$ 99.5% объектов – класса «здоров», остальные объекты – классов B,C,D (различные виды злокачественных новообразований)

Мы создали и обучили модель, которая обладает очень высокой чувствительностью: не пропускает ни одного случая злокачественного новообразования. Но при этом доля ложноположительных диагнозов довольно высока: 2% диагностируемых пациентов.

Каково значение меры качества $Accuracy$ для такой модели?

$$Acc = 0{,}98$$

TP – True Positive, доля верно определенных ответов класса «1» («Истина»)
TN – True Negative, доля верно определенных ответов класса «0» («Ложь»)
FP – False Positive (False alarms), доля ответов класса 0, ошибочно классифицированных как положительные
FN – False Negative (Misses), доля ответов класса 1, ошибочно классифицированных как отрицательные

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth	Ответ нашей модели: НЕТ	Ответ нашей модели: ДА	
НЕТ	TN 975	FP 20	995
ДА	FN 0	TP 5	5
	1000		

Negative Predictive Value

$$NPV = \frac{TN}{TN + FN}$$

$$\mathrm{N}PV = \frac{975}{975 + 0} = 1{,}0$$

Какая доля объектов, идентифицированных (тестом/алгоритмом/моделью) как объекты класса «0», действительно имеют класс «0».

С какой вероятностью пациент действительно здоров, если тест выдал отрицательный результат.

Когда **NPV близок к нулю** (если **доля FN велика**), наша модель на предоставленных данных «предпочитает» выдавать ложноотрицательный ответ вместо положительного – то есть, «**по умолчанию пациент скорее здоров**». Относительно положительного результата теста это консервативная оценка.

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth	Ответ нашей модели: НЕТ	Ответ нашей модели: ДА	
НЕТ	TN 975	FP 20	995
ДА	FN 0	TP 5	5
			1000

Positive Predictive Value, PPV, **Precision,** Точность

$$P = \frac{TP}{TP + FP}$$

$$P = \frac{5}{5 + 20} = 0{,}2$$

Какая доля объектов, идентифицированных как класс «1», действительно имеют класс «1»

С какой вероятностью пациент действительно болен, если тест выдал положительный результат.

Когда **точность близка к нулю** (**доля FP велика**), наша модель на предоставленных данных «предпочитает» выдавать ложноположительный ответ вместо отрицательного – то есть, «по умолчанию **пациент скорее болен**».

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth \ Ответ нашей модели	НЕТ	ДА	
НЕТ	TN 975	FP 20	995
ДА	FN 0	TP 5	5
	1000		

Чувствительность, полнота, Sensitivity, **Recall**, True Positive Rate, TPR

$$R = \frac{TP}{TP + FN}$$

$$R = \frac{5}{0 + 5} = 1{,}0$$

Какая доля объектов класса «1» определяются (тестом/алгоритмом/моделью) как имеющие класс «1»?

С какой вероятностью тест даст положительный результат, если пациент болен?

Когда чувствительность (теста, модели, алгоритма) близка к нулю (доля FN велика), наша модель на предоставленных данных пропускает слишком много «положительных» объектов – тест/модель/алгоритм не слишком чувствителен

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

ground truth \ Ответ нашей модели	НЕТ	ДА	
НЕТ	TN 975	FP 20	995
ДА	FN 0	TP 5	5
	1000		

Специфичность, Specificity, True Negative Rate, TNR

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

$$\text{Specificity} = \frac{975}{975 + 20} = 0{,}98$$

Какая доля объектов класса «0» определяются (тестом/алгоритмом/моделью) как имеющие класс «0»?

С какой вероятностью тест даст отрицательный результат, если пациент здоров?

Когда специфичность теста/модели/алгоритма близка к нулю (доля FP велика), наша модель на предоставленных данных слишком часто выдает положительный ответ(диагноз) в тех случаях, когда объект на самом деле класса «0». Такой тест (такая модель, такой алгоритм) не слишком специфичен для решаемой задачи.

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Ответ нашей модели

ground truth	НЕТ	ДА	
НЕТ	TN 975	FP 20	995
ДА	FN 0	TP 5	5
	1000		

F_β-мера

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

$$\boldsymbol{F_1 = 2\frac{P*R}{P+R}}$$

$$F_1 = 2*\frac{0.2*1}{0.2+1} = 0{,}333$$

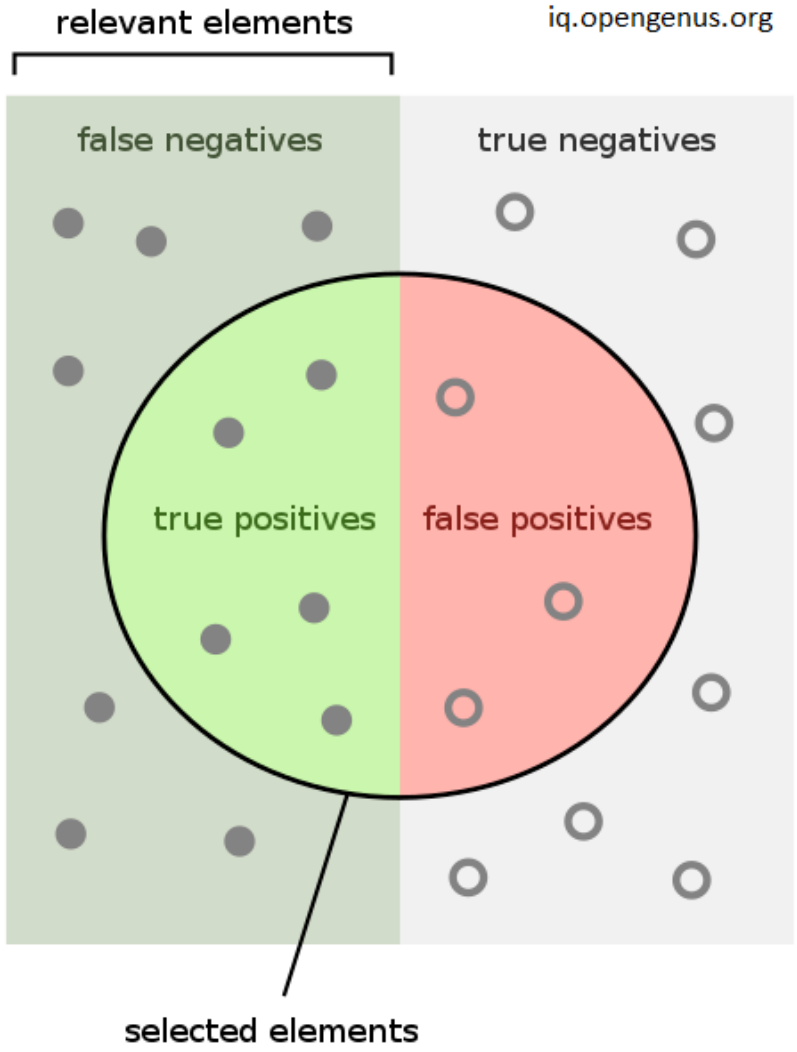
F_1-мера – среднее гармоническое точности и полноты

Точность: $P = \frac{TP}{TP+FP}$

Полнота: $R = \frac{TP}{TP+FN}$

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

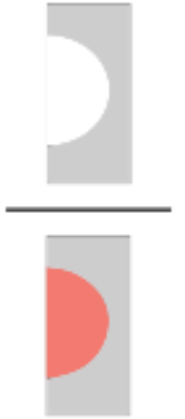


How many relevant items are selected? e.g. How many sick people are correctly identified as having the condition.

Sensitivity= (Recall)

How many negative selected elements are truly negative? e.g. How many healthy people are identified as not having the condition.

Specificity = (Precision)

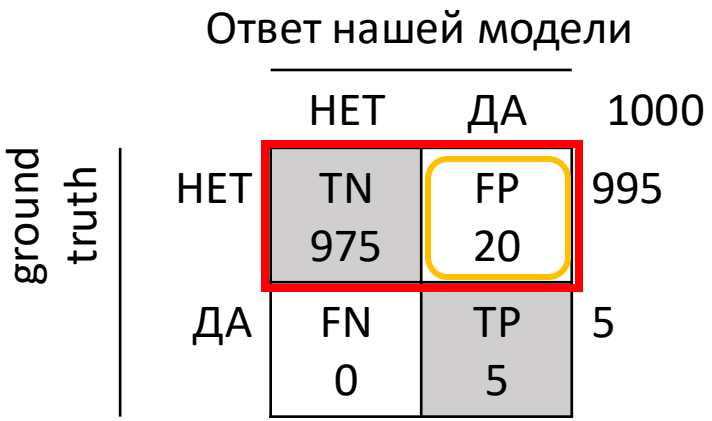


Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

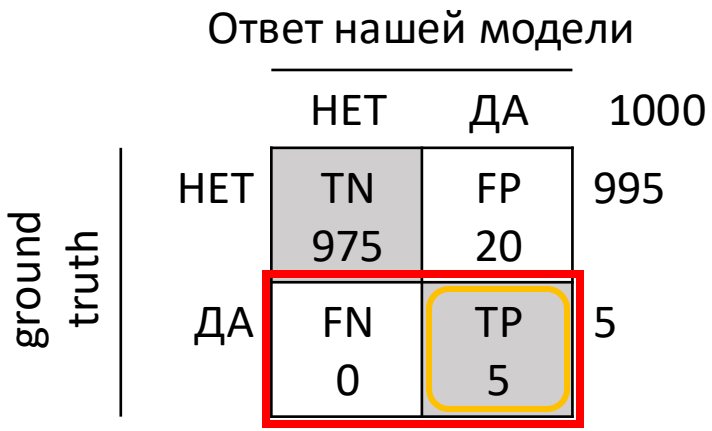
AUC ROC

FPR



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

TPR (Recall)

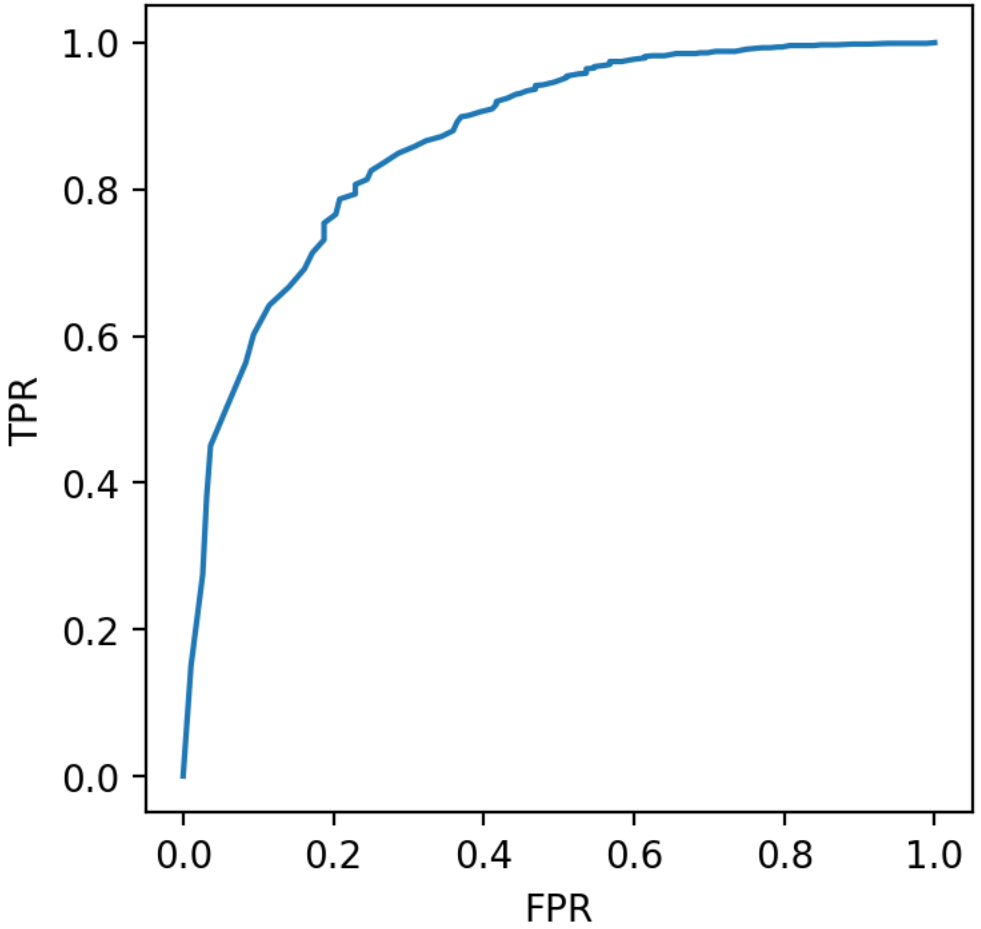


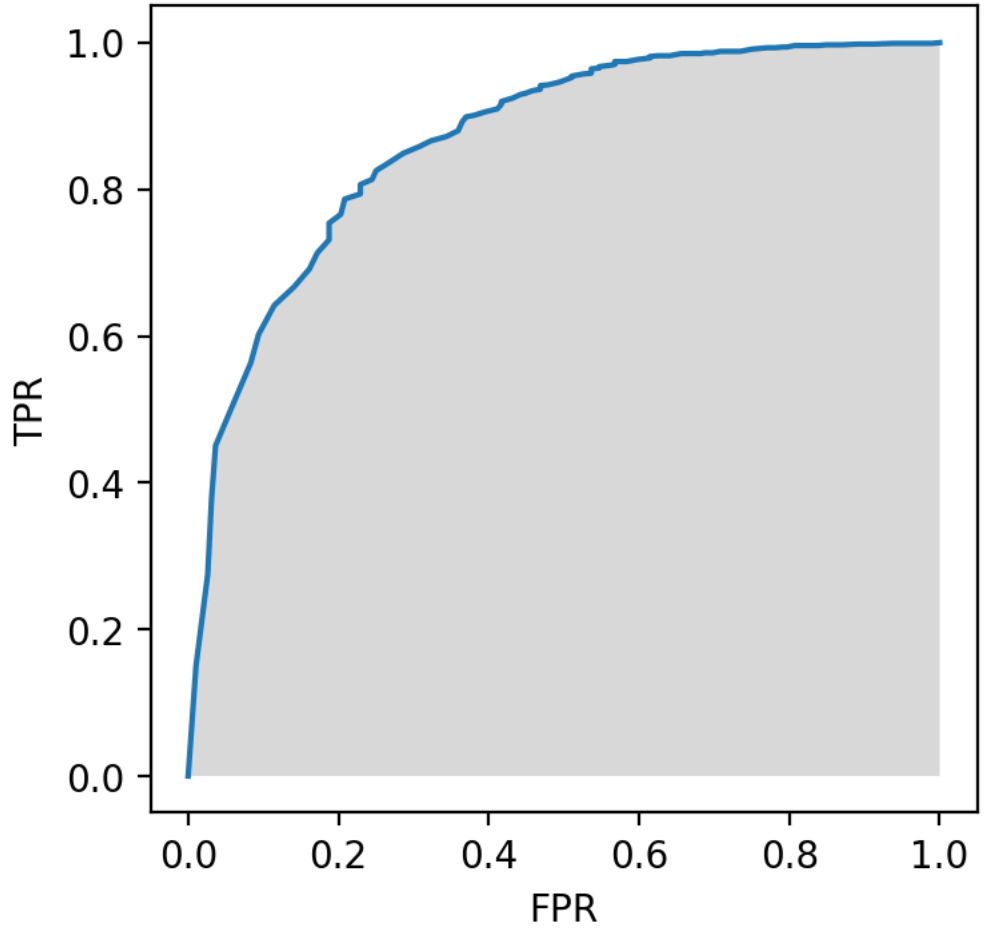
$$TPR = \frac{TP}{TP + FN}$$

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

AUC ROC





Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

AUC ROC

- AUC ROC характеризует метод/алгоритм/тест в целом, а не конкретную реализацию с заданным пороговым значением вероятности;
- AUC ROC инвариантен к пороговому значению вероятности;
- AUC ROC инвариантен к масштабу оценки вероятности (зависит от ранжирования объектов, но не абсолютных значений вероятностей);

Mindray IgG-антитела к антигенам вируса SARS-CoV-2 выявлены в 165 образцах (99,4%), на «Вектор-Бест» – в 164 сыворотках (98,8%), на «Диагностических системах» – в 151 (90,96%), на Хема – в 154 (92,8%), а на Abbott – в 155 образцах (93,4%). При этом 135 (81,33%) образцов были положительными во всех тест-системах, тогда как 30 образцов имели дискордантные результаты (18,07%), а в 9 сыворотках специфических IgG не обнаруживалось в 2 и более тест-системах. ROC-анализ выявил высокую диагностическую ценность всех исследованных тест-систем (AUC от 0,908 до 0,998), что свидетельствует о высоком качестве разделительной модели положительных и отрицательных образцов ($p < 0,001$). При заданных производителями тест-систем cut-off чувствительность и специфичность находилась в диапазоне от 82,8% и 93,3% для набора