



Машинное обучение в науках о Земле

Михаил Криницкий

К.Т.Н., Н.С.

Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и
мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)



Задачи классификации

Михаил Криницкий

К.Т.Н., Н.С.

Институт океанологии РАН им. П.П. Ширшова

Лаборатория взаимодействия океана и атмосферы и
мониторинга климатических изменений (ЛВОАМКИ)

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 А, остальные объекты – классов В,С,Д

Мы создали и обучили модель, которая для любого нового объекта выдает результат «это объект класса А»

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 А, остальные объекты – классов В,С,Д

Мы создали и обучили модель, которая для любого нового объекта выдает результат «это объект класса А»

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 А, остальные объекты – классов В,С,Д

Мы создали и обучили модель, которая для любого нового объекта выдает результат «это объект класса А»

Каково значение меры качества *Accuracy* для такой модели?

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

$$Acc = 95\%$$

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

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?

		Ответ нашей модели	
		НЕТ	ДА
ground truth	НЕТ		
	ДА		

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

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?

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

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

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

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

Оценка качества моделей классификации

Меры качества в задаче бинарной классификации

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

- Negative Predictive Value, $NPV = \frac{TN}{TN+FN} = \frac{975}{975+0} = 100\%$

Когда NPV близок к нулю (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

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

- Positive Predictive Value, PPV, Precision (точность), $P = \frac{TP}{TP+FP} = \frac{5}{20+5} = 20\%$.

Когда PPV близок 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

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

- Чувствительность, полнота, Recall, True Positive Rate, TPR, $R = \frac{TP}{TP+FN} = \frac{5}{0+5} = 100\%$

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

Представим следующую задачу (и решение):

В наборе данных по диагностике онкологических заболеваний 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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

- Специфичность, True Negative Rate, TNR, Specificity = $\frac{TN}{TN+FP} = \frac{975}{975+20} = 98\%$

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

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?

$$Acc = 98\%$$

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

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

- F-мера: $F_{\beta} = (1 + \beta^2) \frac{P * R}{(\beta^2 * P) + R} = \{\beta = 1\} = \frac{P * R}{P + R}; \quad F_1 = \frac{0.2 * 1}{0.2 + 1} = 0.167$