Méthodes de discrimination

Partie IV – Comparaison de méthodes

2019

Brigitte Gelein – <u>bgelein@ensai.fr</u> Marine Depecker





Sommaire

Contexte	4
1. Matrice de confusion	5
2. Courbe ROC	13
3. Aire sous la courbe ROC	37
4. Courbe LIFT	41
5. Aire sous la courbe LIFT	48
6. Conclusion	50

B. Gelein M. Depecker

Contexte

- Comparaison des résultats des méthodes de discrimination (classement)
 - Analyse discriminante (LDA ou QDA)
 - Arbre de classement (Classification trees)
 - Bayésien naïf
 - Les K plus proches voisins
- Problématique de classement
 - Variable à expliquer Y nominale (ou ordinale)
 - « Classes », « étiquettes », « labels », etc.
 - Variables explicatives X de nature diverse



B. Gelein M. Depecker

Contexte de la classification binaire

Principe : confronter la vraie valeur avec la prédiction

Valeurs observées

	Y=1	Y=0	Total
Y=1	n11	n10	n11+n10
Y=0	n01	n00	n01+n00
Total	n11+n01	n10+n00	n



B. Gelein M. Depecker

.

1 - Matrice de confusion

Principe : confronter la vraie valeur avec la prédiction

Valeurs prédites

valeurs observées

	Y=1	Y=0	Total
Y=1	n11	n10	n11+n10
Y=0	n01	n00	n01+n00
Total	n11+n01	n10+n00	n



B. Gelein M. Depecker

		Valeurs		
		Y=1	Y=0	Total
/aleurs sservées	Y=1	n11	n10	n11+n10
Valeu	Y=0	n01	n00	n01+n00
	Total	n11+n01	n10+n00	n

Grandeurs d'intérêt

- Vrais positifs VP = n11; Vrais négatifs VN = n00
- Faux positifs FP = n01; Faux négatifs FN = n10

Indicateurs

- Taux de bien classés $\frac{n11+n00}{n}$, estime P($\hat{Y}=Y$)
- Taux d'erreur $\frac{n01+n10}{n}$, estime $P(\hat{Y}\neq Y)$



B. Gelein M. Depecker

1

1 - Matrice de confusion

Indicateurs (suite)

		Valeurs		
		Y=1	Y=0	Total
Valeurs observées	Y=1	n11	n10	n11+n10
Vale	Y=0	n01	n00	n01+n00
	Total	n11+n01	n10+n00	n

- Taux de VP $\frac{n11}{n11+n10}$, estime la sensibilité P($\hat{Y}=1/Y=1$)
- Taux de FP $\frac{n01}{n01+n00}$, estime P($\hat{Y}=1/Y=0$)
- 1-Taux de FP $\frac{n00}{n01+n00}$, estime la spécificité P(\hat{Y} =0/Y=0)



B. Gelein M. Depecker

Pour vérifier que le % d'individus correctement classés est significativement meilleur que par un classement aléatoire, on calcule le **Q-Press**:

 $Q_{press} = \frac{(n - (c \times k))^2}{n \times (k - 1)}$

Notations

- n = taille échantillon
- k = nombre de groupes ⇒ ici k= 2
- c = nombre d'individus bien classés ⇒ c=n11+n00
- Sous H0 (classe comme le hasard),
 Q-Press suit un χ² à 1 degré de liberté



B. Gelein M. Depecker

1 - Matrice de confusion

Sensibilité et spécificité : une autre interprétation

- Notion de score
 - Discrimination de deux groupes G1 (les positifs, Y=1) par rapport à G2 (les négatifs, Y=0) à partir d'un score
 - Règle de décision : si score ≥ seuil alors G1, sinon G2
- En fonction du seuil z de séparation du score :
 - Sensibilité : Sensi (z) = P(score ≥ z / G1)
 - > probabilité de bien détecter un positif
 - **Spécificité** : *Spéci* (z) = P(score < z / G2)
 - > probabilité de bien détecter un négatif

ENSAI

B. Gelein M. Depecker

Lien entre scoring et classification binaire

• Un classifieur binaire peut s'écrire sous la forme :

$$C(x) = 2 \cdot I \left\{ P(Y = +1 | X = x) \ge \frac{1}{2} \right\} - 1$$

où I {.} est la fonction indicatrice

• Ou plus généralement :

$$C_z(x) = 2 \cdot I\{s(x) \ge z\} - 1$$

où z est un seuil et s une fonction de score



11

M. Depecker

B. Gelein

1 - Matrice de confusion

Choix d'un classifieur : identification du seuil z

 Pour un modèle de score, on peut chercher la valeur de z qui maximise la sensibilité ET maximise la spécificité (minimise les faux positifs)

Un bon classifieur permet de capturer le plus possible de vrais positifs avec le moins possible de faux positifs



B. Gelein M. Depecker

Contexte de la classification binaire

- ROC: « Receiver Operating Characteristic »
- Plan ROC
 - en ordonnée : estimation de la sensibilité (TVP)
 - en abscisse : estimation de 1 spécificité (TFP)
- Un classifieur est caractérisé par un point unique dans l'espace ROC
- Le plan ROC permet de comparer des classifieurs (et/ou des fonctions de score)



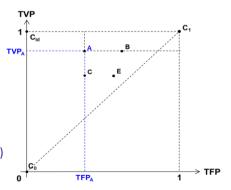
B. Gelein M. Depecker

13

2 - Courbe ROC

Exemple:

- A est meilleur que C (même TFP mais TVP plus élevé)
- A est meilleur que B (même TVP mais TFP plus faible)
- C est meilleur que E (même TVP mais TFP plus faible)
- B semble meilleur que E (presque même TFP mais TVP plus élevé)
- E est globalement plus mauvais
- · A est globalement meilleur



ENSAI

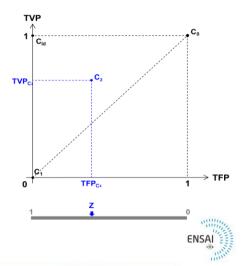
B. Gelein M. Depecker

Point de vue du scoring

• Un classifieur s'écrit

$$C_z(x) = 2 \cdot I\{s(x) \ge z\} - 1$$

- En faisant varier le seuil z, on obtient des couples (TFP₂, TVP₂)
- Chaque point caractérise un classifieur qui correspond à la fonction de score s avec un seuil spécifié z



B. Gelein M. Depecker

15

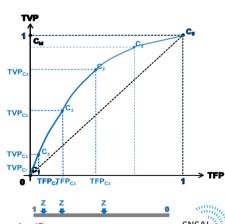
2 – Courbe ROC

Point de vue du scoring

• Un classifieur s'écrit

$$C_z(x) = 2 \cdot I \left\{ s(x) \ge z \right\} - 1$$

- En faisant varier le seuil z, on obtient des couples (TFP_z, TVP_z)
- Chaque point caractérise un classifieur qui correspond à la fonction de score s avec un seuil spécifié z
- → En faisant varier le seuil z, on définit <u>la</u>
 <u>courbe ROC</u>

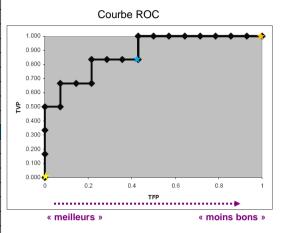


Chaque point de la courbe ROC caractérise un classifieur qui correspond à la fonction de score s avec un seuil spécifié z

B. Gelein M. Depecker

Individu	5	Score	Y observé	TFP	TVP
				0	0.000
1		1	1	0.000	0.167
2		0.95	1	0.000	0.333
3			1	0.000	0.500
4		0.85	0	0.071	0.500
5		0.8	1	0.071	0.667
6		0.75	0	0.143	0.667
7		0.7	0	0.214	0.667
8		0.65	1	0.214	0.833
9		0.6	0	0.286	0.833
10		0.55	0	0.357	0.833
11			0	0.429	0.833
12		0.45	1	0.429	1.000
13		0.4	0	0.500	1.000
14		0.35	0	0.571	1.000
15		0.3	0	0.643	1.000
16		0.25	0	0.714	1.000
17			0	0.786	1.000
18		0.15	0	0.857	1.000
19		0.1	0	0.929	1.000
20	1	0.05	0	1.000	1.000

Exemple



ENSAI Source: R. Rakotomalala

B. Gelein M. Depecker

Individu	Score	Y observé	TFP	TVP
			0	0.000
1	: 1	1	0.000	0.167
2	0.95	1	0.000	0.333
3	0.9	1	0.000	0.500
4	0.85	0	0.071	0.500
5	0.8	1	0.071	0.667
6	0.75	0	0.143	0.667
7	0.7	0	0.214	0.667
8	0.65	1	0.214	0.833
9	0.6	0	0.286	0.833
10	0.55	0	0.357	0.833
11	0.5	0	0.429	0.833
12	0.45	1	0.429	1.000
13	0.4	0	0.500	1.000
14	0.35	0	0.571	1.000
15	0.3	0	0.643	1.000
16	0.25	0	0.714	1.000
17	0.2	0	0.786	1.000
18	0.15	0	0.857	1.000
19	0.1	0	0.929	1.000
20	0.05	0	1.000	1.000

Au seuil z = 1

Prédit

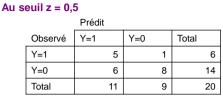
Observé	Y=1	Y=0	Total
Y=1	1	5	6
Y=0	0	14	14
Total	1	19	20

	1	Ol	\/ A	1 1/ 0		T-4-1		
0.500		Observé	Y=1	Y=0		Total		
0.500		Y=1	1		5		6	
0.667		Y=0	0		14		14	
0.667	1	Total	1		19		20	
0.667]	T\/D 4	/C 0 4 C 7	, TE	2 0/	1.4.0		
0.833	1	IVP=1	/6=0,167	IFF	=0/	14=0		
0.833	1 1							
0.833								
0.833	: Au seuil z = 0,95							
1.000	Prédit							
1.000		Observé	Y=1	Y=0		Total		
1.000		Y=1	2	,	4		6	
1.000			_	+				
1.000		Y=0	C	_	14		14	
1 000	1	Total	2	!	18		20	

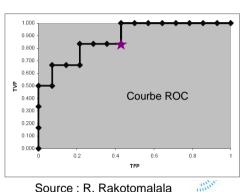
TVP=2/6=0,333 TFP=0/14=0

Source: R. Rakotomalala

Inc	dividu	Score	Y observé	TFP	TVP
				0	0.000
	1	1	1	0.000	0.167
	2	0.95	1	0.000	0.333
	3	0.9	1	0.000	0.500
	4	0.85	0	0.071	0.500
	5	0.8	1	0.071	0.667
	6	0.75	0	0.143	0.667
	7	0.7	0	0.214	0.667
	8	0.65	1	0.214	0.833
	9	0.6	0	0.286	0.833
	10	0.55	0	0.357	0.833
•	11	0.5	0	0.429	0.833
	12	0.45	1	0.429	1.000
	13	0.4	0	0.500	1.000
	14	0.35	0	0.571	1.000
	15	0.3	0	0.643	1.000
	16	0.25	0	0.714	1.000
	17	0.2	0	0.786	1.000
	18	0.15	0	0.857	1.000
	19	0.1	0	0.929	1.000
	20	0.05	0	1.000	1.000



TVP=5/6=0,833 TFP=6/14=0,429



Source: R. Rakotomalala

B. Geleii M. Depecker



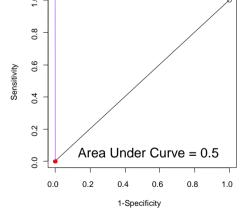
roc.demo(x = rnorm(25, 10, 1),y = rnorm(25, 11, 1.5))

<u>lci paramètre x de roc.demo :</u>

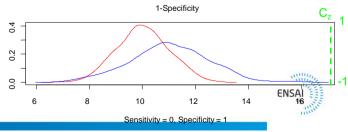
distribution du score pour la modalité 0 de Y

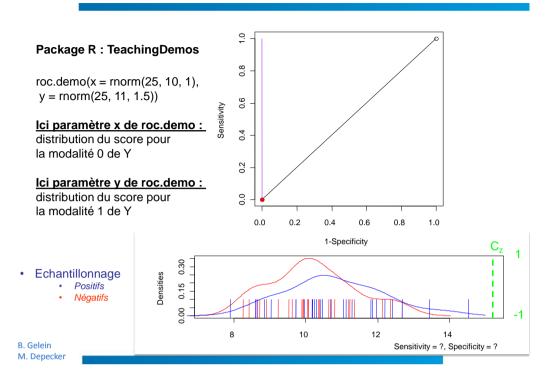
lci paramètre y de roc.demo :

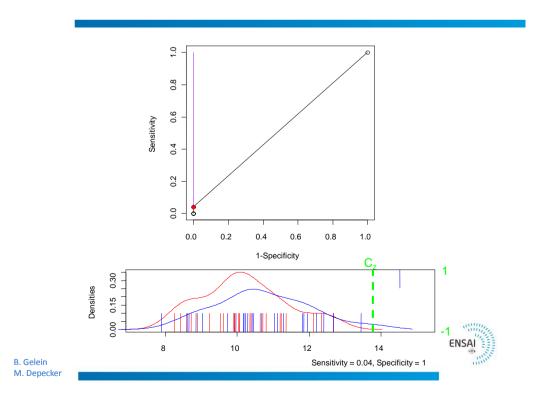
distribution du score pour la modalité 1 de Y

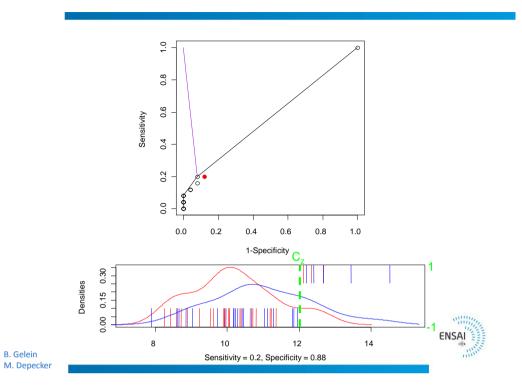


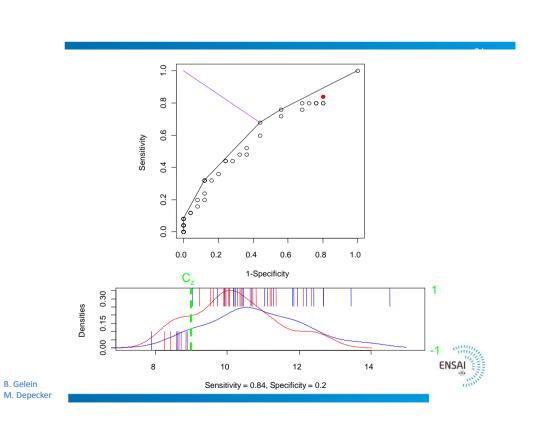
- · Densité des positifs : bleu
- Densité des négatifs : rouge

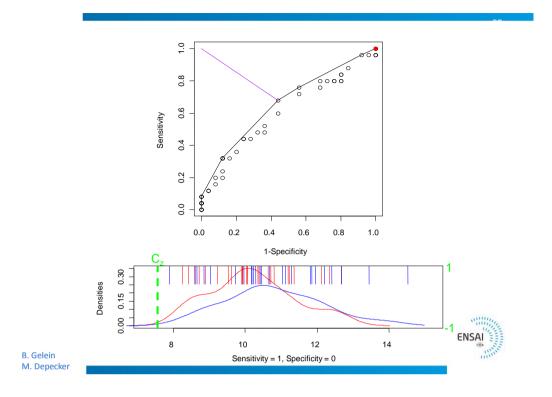








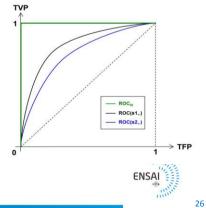


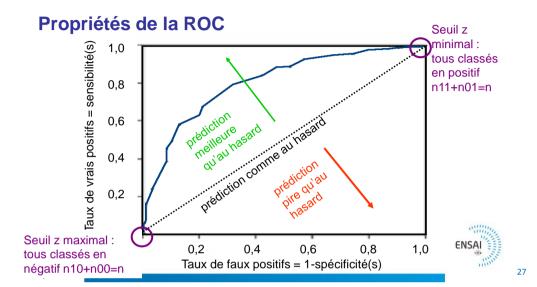


Propriétés de la ROC : une courbe paramétrique

- Collection de classifieurs binaires : $\{C_z(x) = 2 \cdot \mathbb{I}\{s(x) \geq z\} 1, z \in \mathbb{R}\}$
- Taux de faux positifs (TFP) : ${\rm TFP}_{\mathcal{S}}(z) = \mathbb{P}\left\{s(X) \geq z \mid Y = -1\right\}$
- Taux de vrais positifs (TVP) : ${\scriptsize \text{TVP}}_s(z) = \mathbb{P}\left\{s(X) \geq z \mid Y = +1\right\}$

 $\mathrm{ROC}: \quad z \mapsto \big(\mathrm{TFP}_s(z), \mathrm{TVP}_s(z)\big)$





2 - Courbe ROC

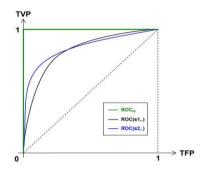
Propriétés de la ROC

- Elles est **invariante** pour toute transformation monotone croissante du score
- C'est un outil de comparaison de modèles (scores et classifieurs)



B. Gelein M. Depecker

Propriétés de la ROC



B. Gelein

M. Depecker

- La courbe ROC induit un **ordre partiel** sur l'ensemble des fonctions de score \mathcal{S}
- s₁ est plus performante que s₂ ssi

$$\forall \alpha \in]0,1[, ROC(s_1,\alpha) \ge ROC(s_2,\alpha)$$

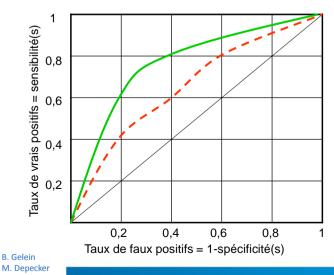
- La courbe ROC optimale correspond à la probabilité η

$$\forall s \in \mathcal{S}, \forall \alpha \in]0,1[,$$
 $ROC^*(\alpha) = ROC(\eta,\alpha) \ge ROC(s,\alpha)$
(argument de Neymann-Pearson)

où
$$\eta(x) = P(Y = +1 | X = x)$$

29

2 – Courbe ROC



Modèle(s) M1

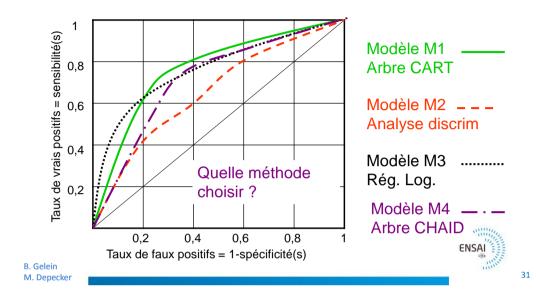
Modèle(s) M2 _ _ _ _

La courbe de M1 est toujours « au-dessus » de celle de M2 :

les classifieurs de M1 sont meilleurs en prédiction quel que soit le seuil z

ENSAI

30



2 - Courbe ROC

Enveloppe convexe – ou comment éliminer d'office les modèles les moins intéressants ?

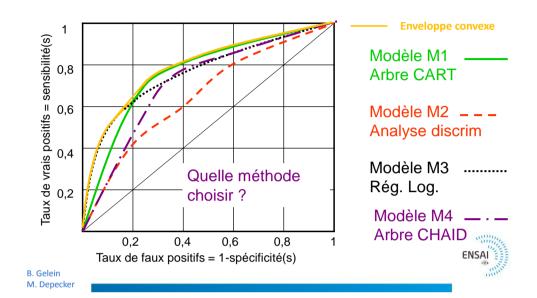
- L'enveloppe convexe permet d'effectuer une première sélection dans un ensemble de modèles donné
- Elle est formée par les courbes ou parties de courbes, telles qu'il n'existe pas d'autre courbe « au-dessus » d'elles
- Les courbes situées sur cette enveloppe correspondent aux modèles les plus performants pour une matrice de coût donnée



B. Gelein M. Depecker

32

16



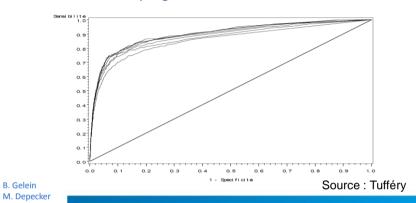
2 - Courbe ROC

Enveloppe convexe – ou comment éliminer d'office les modèles les moins intéressants?

- Sont éliminés d'office les modèles ne participant jamais à cette enveloppe
- Dans l'exemple, l'enveloppe convexe est formée par les courbes de M1 (arbre de classement CART) et M3 (régression logistique).
 - M2 est dominé par tous les modèles, il est donc
 - M4 peut être meilleur que M3 dans certains cas, mais pour ces cas là, il s'avère moins bon que M2. ENSAI M4 est donc éliminé.

Autre usage de la courbe ROC

• On peut aussi tracer les courbes ROC correspondant à une entrée progressive de variables dans un modèle



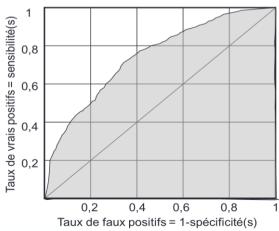
ENSAI

35

3 - Aire sous la courbe ROC

Aire AUC sous la courbe ROC

$$AUC(s) = \int_{\alpha=0}^{1} ROC(s, \alpha) d\alpha$$



B. Gelein M. Depecker

3 – Aire sous la courbe ROC

Aire AUC sous la courbe ROC

- La capacité prédictive d'un modèle est d'autant meilleure que l'aire AUC est proche de 1
- Si l'AUC = 0,5 alors le modèle n'est pas meilleur qu'une prédiction aléatoire (ROC = diagonale)
- Estimation de la probabilité que pour tout couple (A,B) score(individu A)> score(individu B), avec A tiré au hasard dans le groupe G1 (à prédire, par ex « positif ») et B dans le groupe G2

Interprétation : taux de paires concordantes



37

M. Depecker

B. Gelein

3 - Aire sous la courbe ROC

AUC - trois méthodes d'estimation

- 1. Méthode des trapèzes
- 2. Interprétation probabiliste: taux de paires concordantes

$$\begin{split} \forall (X, X') \in \mathcal{X}^2, \ s \in \mathcal{S} \ \text{et pour } p &= \mathbb{P}\{Y = 1\}, \\ \text{AUC}(s) &= \mathbb{P}\left\{s(X) > s(X') \mid (Y, Y') = (+1, -1)\right\} \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \mathbb{P}\left\{s(X) = s(X') \mid (Y, Y') = (+1, -1)\right\}. \\ &= 1 - \frac{1}{2p(1-p)} \cdot \mathbb{P}\left\{(s(X) - s(X'))(Y - Y') < 0\right\} \end{split}$$

ENSAI

B. Gelein M. Depecker

3 – Aire sous la courbe ROC

Estimation du taux de paire concordantes :

- Soit n1 (resp. n2) le nombre d'observations dans G1 (resp. G2)
- Soient les n1*n2 paires formées d'un individu x1 du groupe G1 et d'un individu x2 du groupe G2
- Parmi ces n1*n2 paires on a :
 - concordance si score(x1) >score(x2)
 - discordance si score(x1) < score(x2)
 - nc = nombre de paires concordantes
 - nd = nombre de paires discordantes
 - ne =n1*n2 nc nd = nombre d'ex æquo

$$AUC \approx \frac{nc + \frac{1}{2} (n1 \times n2 - nc - nd)}{n1 \times n2}$$



39

M. Depecker

B. Gelein

3 – Aire sous la courbe ROC

3. Méthode de Mann-Whitney

- L'AUC peut s'exprimer en fonction de la statistique de test de Mann-Whitney U: $AUC = \frac{U}{n! \times n!}$
- U est une statistique de test non-paramétrique permettant d'évaluer l'homogénéité entre deux populations où R₁ (resp. R₂) est la somme des rangs des individus de G₁ (resp. G₂), et

$$U = R_1 - \frac{n1(n1+1)}{2} = R_2 - \frac{n2(n2+1)}{2}$$



$$R_1 + R_2 = \frac{N(N+1)}{2}, \quad avec N = n1 + n2$$

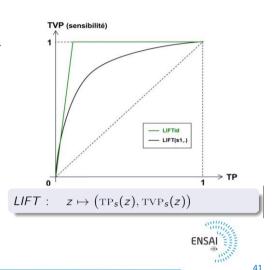
4 – Courbe LIFT

Courbe LIFT ou courbe de gain

 Objectif: La démarche du ciblage marketing

Exemple: publipostage pour la promotion d'un produit

- Taux de répondants vs taux d'individus ciblés
 - Ordonnée: estimation de la sensibilité Proba(score ≥ s / G1) (TVP)
 - Abscisse: estimation du taux de positifs Proba(score ≥ s) (TP)



B. Gelein M. Depecker

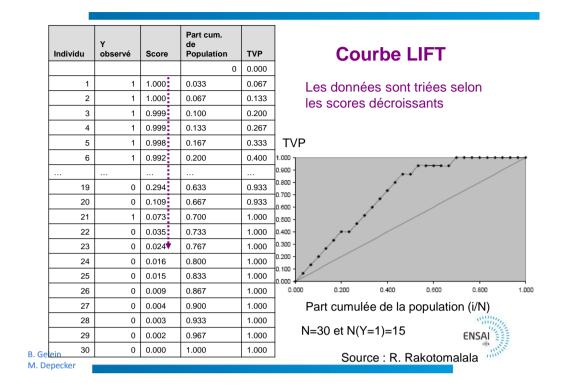
4 - Courbe LIFT

Courbe LIFT ou courbe de gain

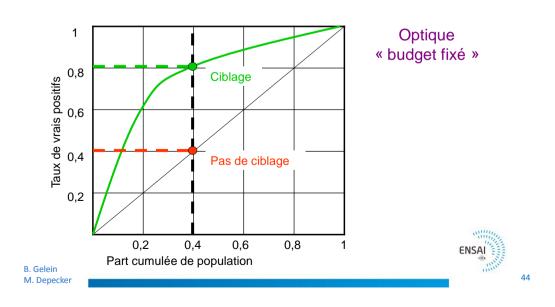
- Cette courbe représente la proportion de vrais positifs en fonction des individus sélectionnés, lorsque l'on fait varier le seuil z du score
- Sa forme dépend du taux de positifs a priori
- Même ordonnée que la courbe ROC, mais une abscisse généralement plus grande
- La courbe de lift est généralement sous la courbe ROC
- ROC et LIFT représentent une information similaire
 - · La diagonale du plan représente une prédiction aléatoire
 - La courbe idéale LIFT est la plus proche du coin supérieur gauche

ENSAI

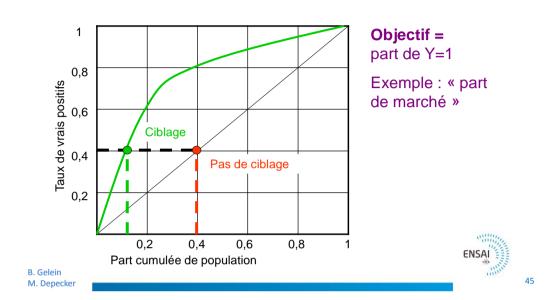
B. Gelein M. Depecker



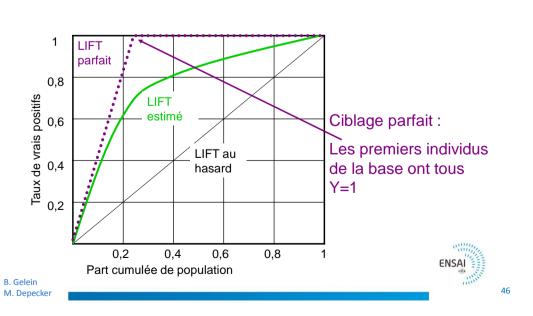
4 - Courbe LIFT



4 - Courbe LIFT



4 - Courbe LIFT



4 - Courbe LIFT

Lien entre courbe de LIFT et courbe ROC

• Si la courbe ROC(s) domine dans le plan (TVP,TFP) alors la courbe LIFT(s) domine dans le plan (TVP,TP) et la fonction de score s est la plus performante

ENSAI

47

B. Gelein M. Depecker

5 – Aire sous la courbe LIFT

Lien entre les aires sous les courbes LIFT et ROC

- On note souvent AUC, parfois AUL l'aire sous la courbe LIFT
- L'AUL s'exprime simplement à partir de l'AUC

$$AUL = \frac{p}{2} + (1 - p)AUC$$

où p = Proba(G1) = probabilité a priori de l'événement Y=1 dans la population



40

5 – Aire sous la courbe LIFT

Lien entre courbe de LIFT et courbe ROC

- Cas particuliers:
 - AUC = $1 \Leftrightarrow AUL = p/2 + (1 p) = 1 p/2$
 - AUC = $0.5 \Leftrightarrow AUL = p/2 + 1/2 p/2 = 0.5$
 - Si p est petite ⇔ AUC et AUL sont proches
 - AUC(M1) > AUC (M2) ⇔ AUL (M1) > AUL (M2)



B. Gelein M. Depecker

49

6 - Conclusion 6.1 – Avantages et Limites

Courbes ROC et LIFT

- · Des critères fonctionnels
 - Faciles à visualiser a posteriori
 - · Difficiles à optimiser directement

Alternative : les aires sous les courbes et critères dérivés

 La courbe ROC ne permet pas de visualiser le rapport entre les deux classes

Difficulté : elle peut induire en erreur dans le cas d'échantillons fortement déséquilibrés

• La forme de la courbe LIFT dépend de l'équilibre des classes dans l'échantillon



B. Gelein M. Depecker Difficulté : elle doit être lue relativement à la LIFT idéale

Conclusion 6.1 – Avantages et Limites

AUC et AUL

B. Gelein

M. Depecker

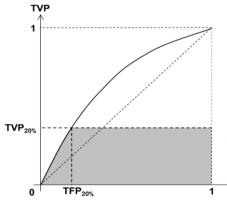
- Des critères réels
 - Simples à calculer et à optimiser
 - L'AUC a une interprétation probabiliste intuitive
- Des critères globaux
 - deux fonctions scores optimales auront même AUC mais des courbes ROC possiblement différentes...
 - ...l'une pouvant être meilleure que l'autre sur une portion des individus!
 - Ne permettent pas de se focaliser sur les meilleures observations



51

Conclusion 6.2 – Alternatives

Exemple: I'AUC partielle



Permet de se focaliser sur les x% meilleures observations

Calcul simple:

 $AUC_{tronqu\'ee~x\%} + \left(1 - TFP_{x\%}\right) \times TVP_{x\%}$

→ TFP

ENSAI

B. Gelein S.Clémençon & N. Vayatis, *Ranking the best instances*, Journal of Machine Learning Research, vol 8, pp 2671-2699, 2007