Méthodes de discrimination

Partie IV – Comparaison de méthodes

2020

Brigitte Gelein – bgelein@ensai.fr

Marine Depecker

ENSAI

École nationale de la statistique et de l'analyse de l'information

B. Gelein
M. Depecker

Sommaire

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

1 - Matrice de confusion

Contexte de la classification <u>binaire</u>

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

1 - Matrice de confusion

Principe : confronter la vraie valeur avec la prédiction

Valeurs observées \ Valeurs prédites	Y=1	Y=0	Total
Y=1	**n11**	**n10**	n11+n10
Y=0	**n01**	**n00**	n01+n00
Total	n11+n01	n10+n00	n

1 - Matrice de confusion

		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

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(Ŷ=Y)
- **Taux d'erreur** $\frac{n01+n10}{n}$, estime P(Ŷ≠Y)

B. Gelein
M. Depecker

1 - Matrice de confusion

Indicateurs (suite)

		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

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

1 - Matrice de confusion

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 $\Rightarrow$ ici k= 2
- c = nombre d'individus bien classés $\Rightarrow$ c=n11+n00
- Sous H0 (classe comme le hasard) ,
  Q-Press suit un χ^2 à 1 degré de liberté

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

1 - Matrice de confusion

Lien entre *scoring* et classification binaire

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

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

où $\mathrm{I}\{.\}$ est la fonction indicatrice

- Ou plus généralement :

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

où z est un seuil et s une fonction de score

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

2 – Courbe ROC

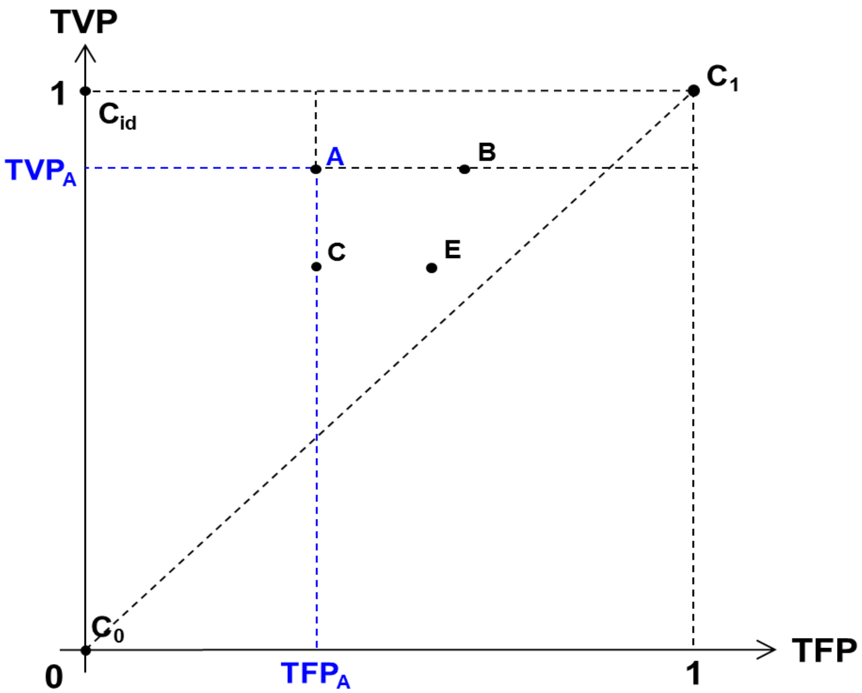
Contexte de la classification <u>binaire</u>

- **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)**

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**

2 – Courbe ROC

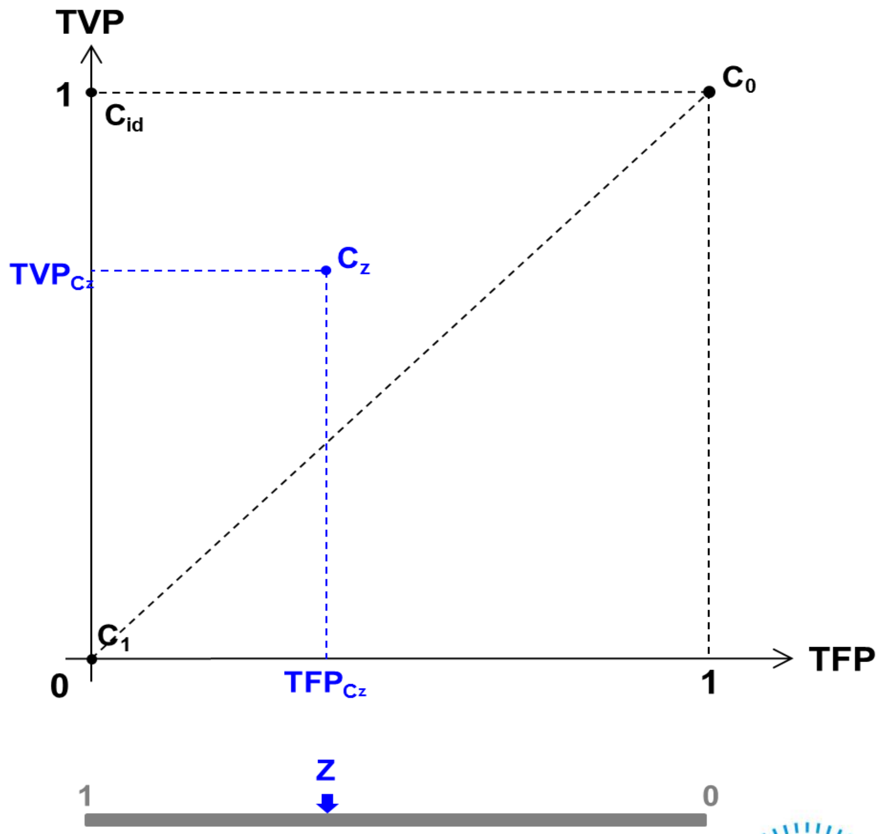
Point de vue du scoring

- Un classifieur s'écrit

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

- 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



2 – Courbe ROC

Point de vue du scoring

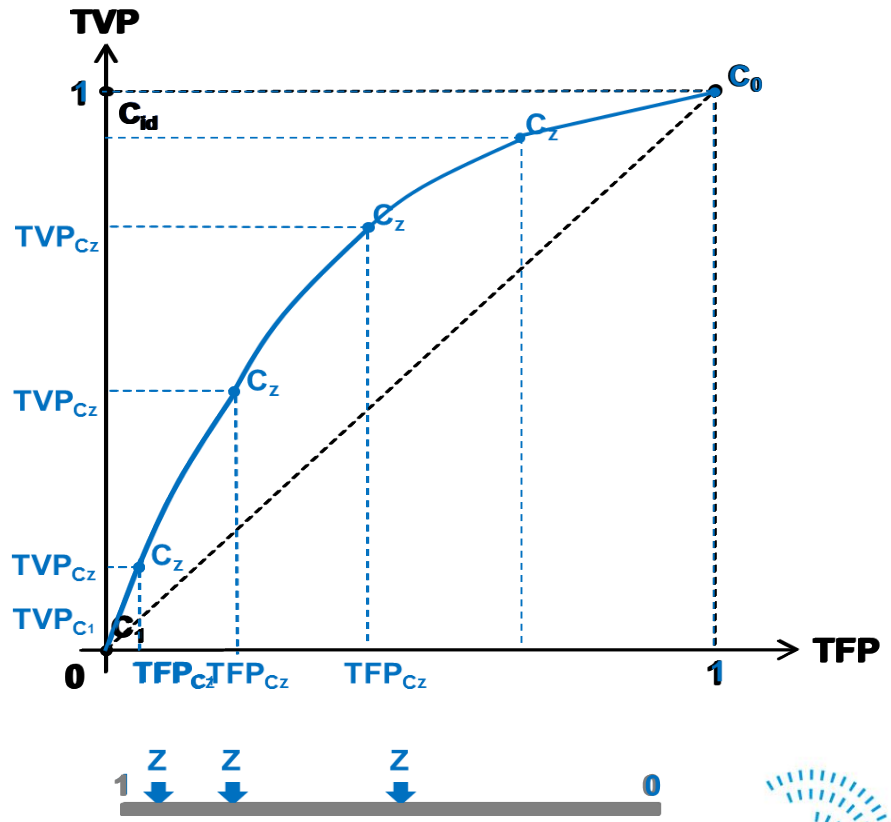
- Un classifieur s'écrit

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

- 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 courbe ROC</u>

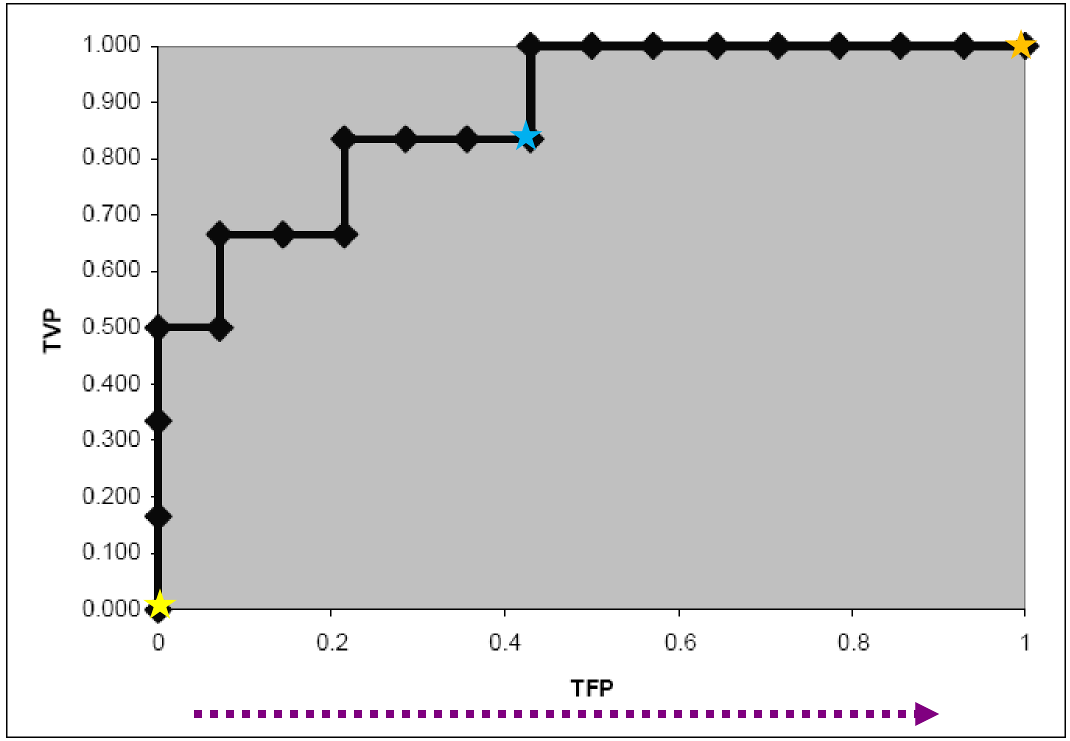


Chaque point de la courbe ROC caractérise un classifieur qui correspond à la fonction de score s avec un seuil spécifié z

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

Exemple

Courbe ROC



« meilleurs » « moins bons »

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

TVP=1/6=0,167 TFP=0/14=0

Au seuil z = 0,95

	Prédit		
Observé	Y=1	Y=0	Total
Y=1	**2**	**4**	6
Y=0	**0**	**14**	14
Total	2	18	20

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

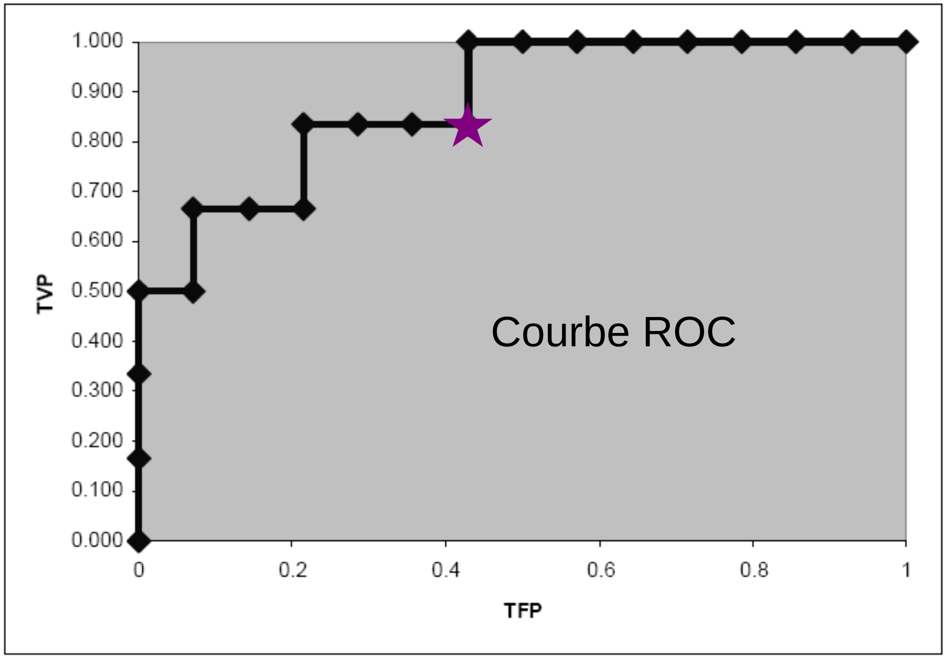
Source : R. Rakotomalala

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 = 0,5

Observé \ Prédit	Y=1	Y=0	Total
Y=1	5	1	6
Y=0	6	8	14
Total	11	9	20

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



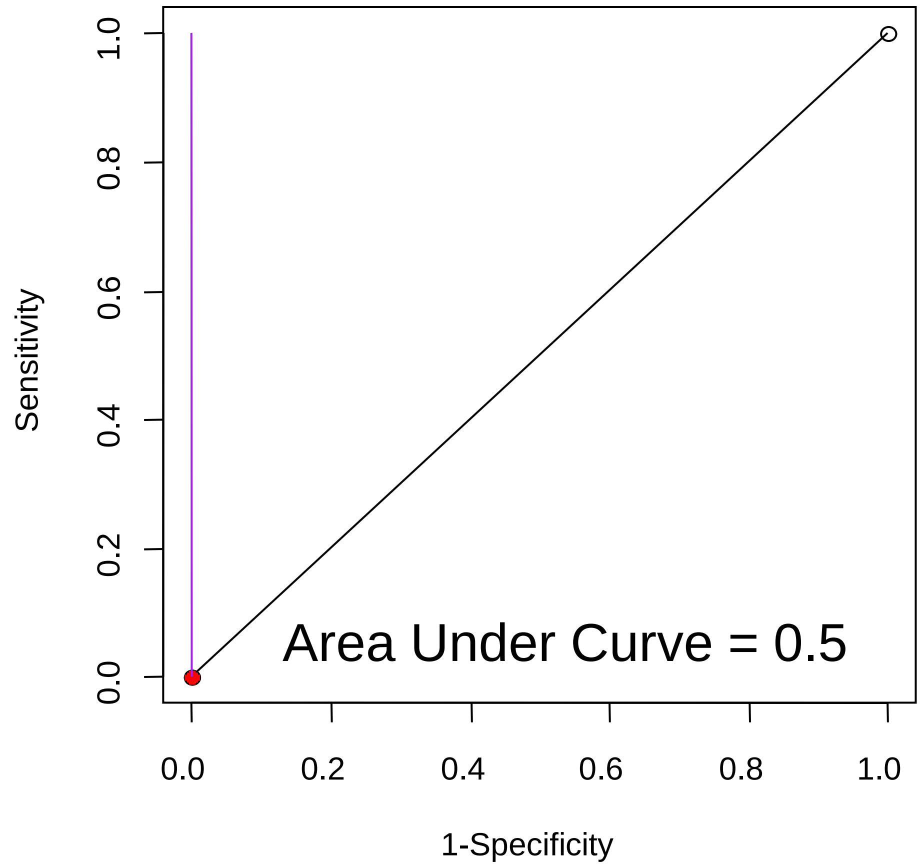
Source : R. Rakotomalala

Package R : TeachingDemos

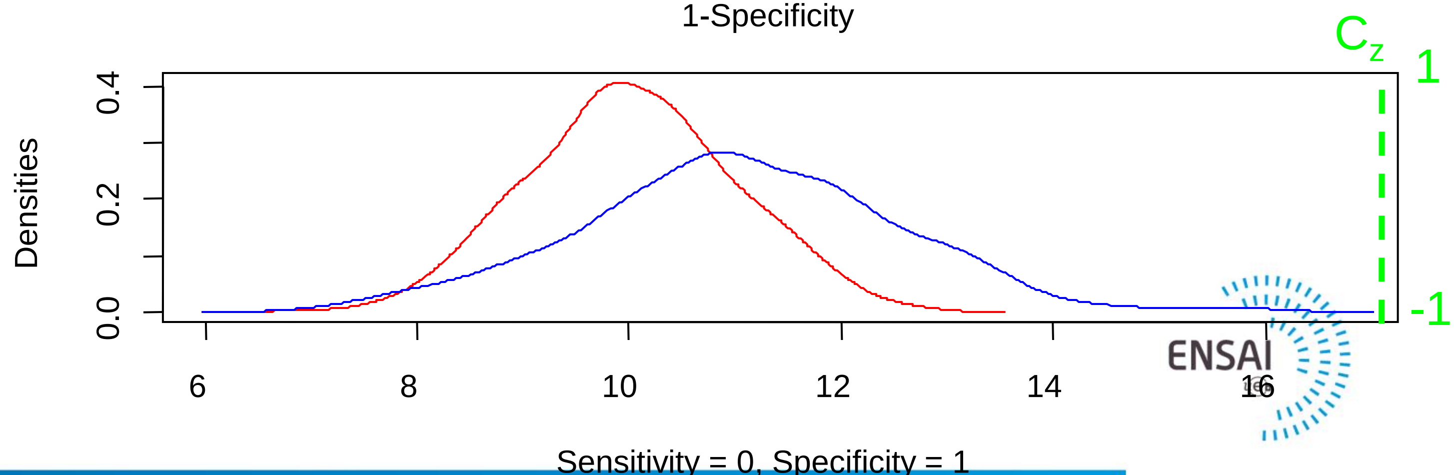
roc.demo(x = rnorm(25, 10, 1),
 y = rnorm(25, 11, 1.5))

<u>Ici paramètre x de roc.demo :</u>
distribution du score pour
la modalité 0 de Y

<u>Ici paramètre y de roc.demo :</u>
distribution du score pour
la modalité 1 de Y



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

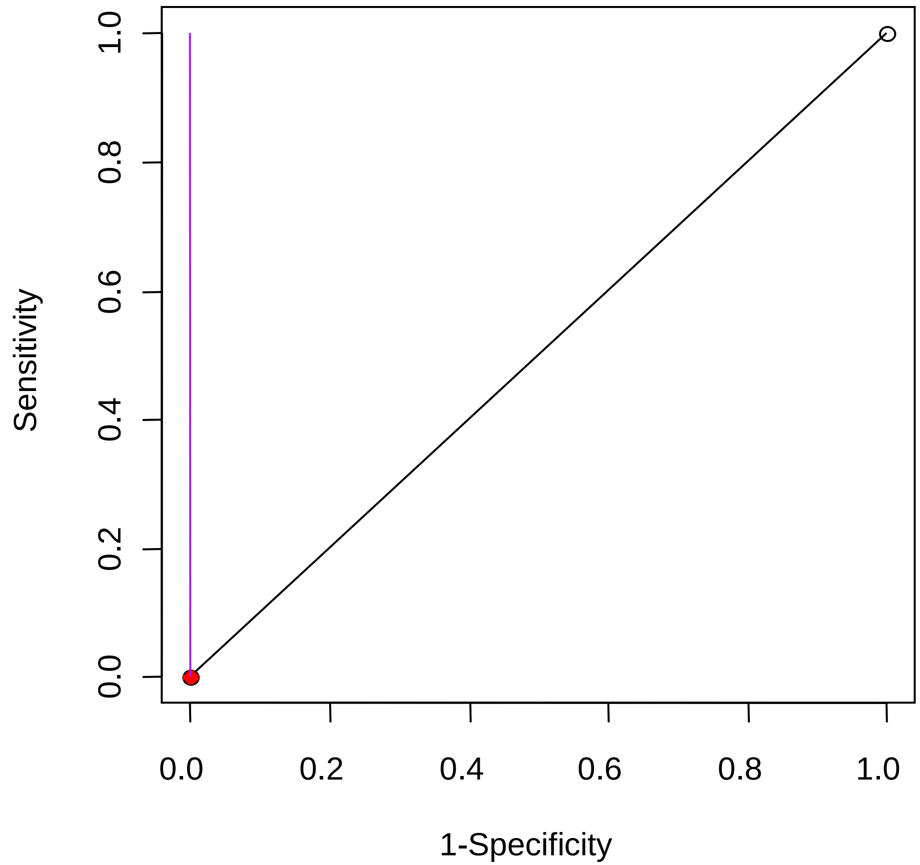


Package R : TeachingDemos

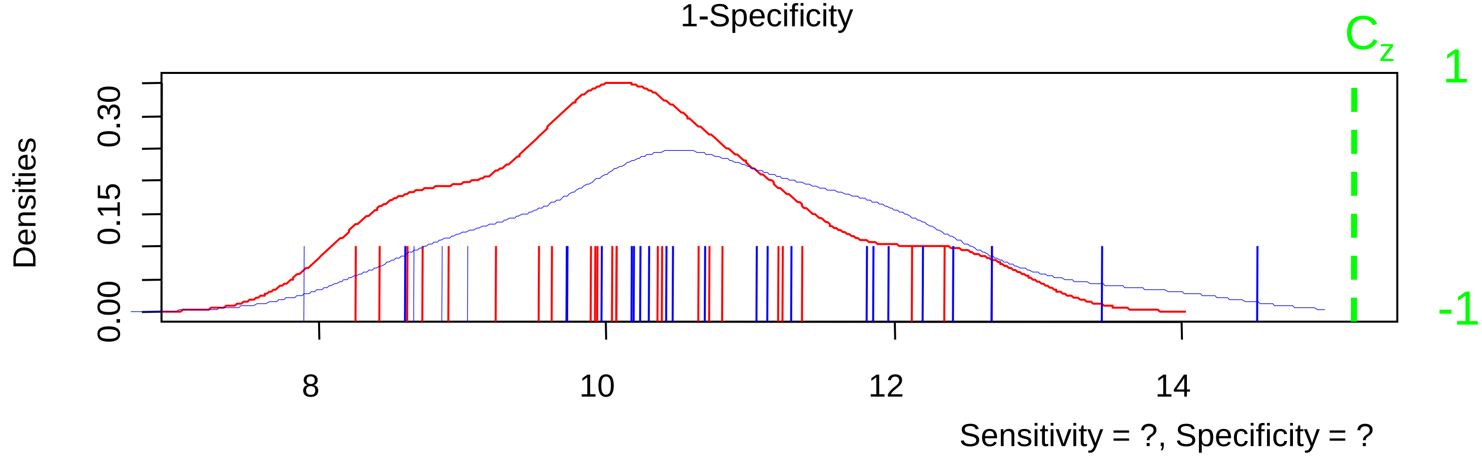
roc.demo(x = rnorm(25, 10, 1),
 y = rnorm(25, 11, 1.5))

<u>Ici paramètre x de roc.demo :</u>
distribution du score pour
la modalité 0 de Y

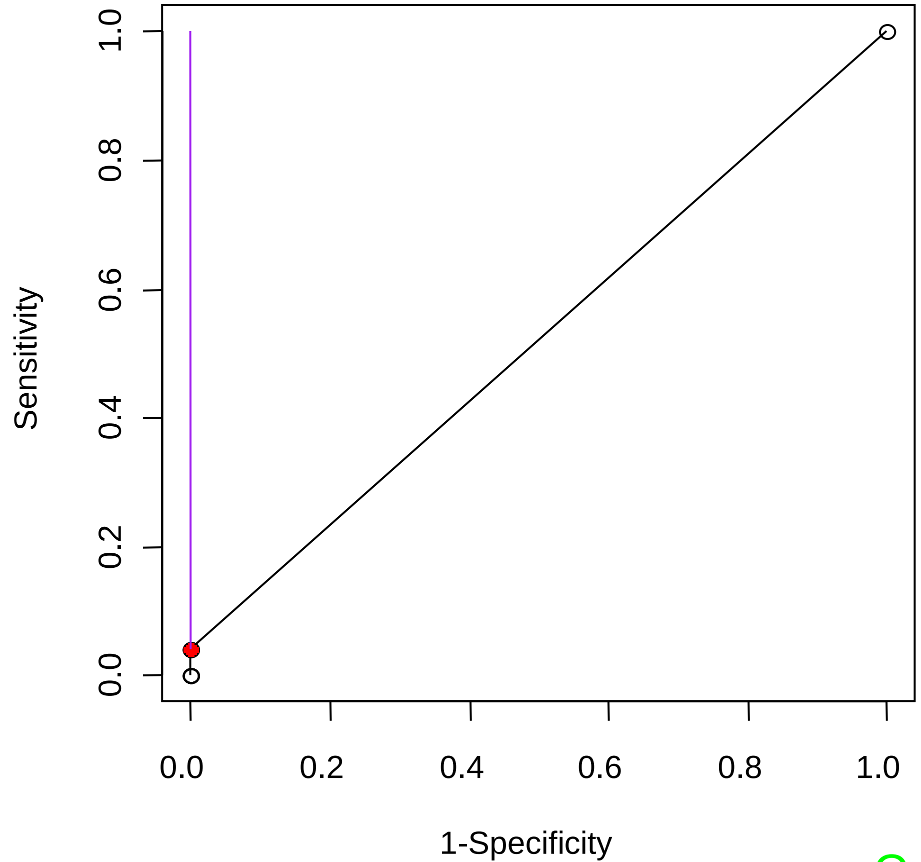
<u>Ici paramètre y de roc.demo :</u>
distribution du score pour
la modalité 1 de Y

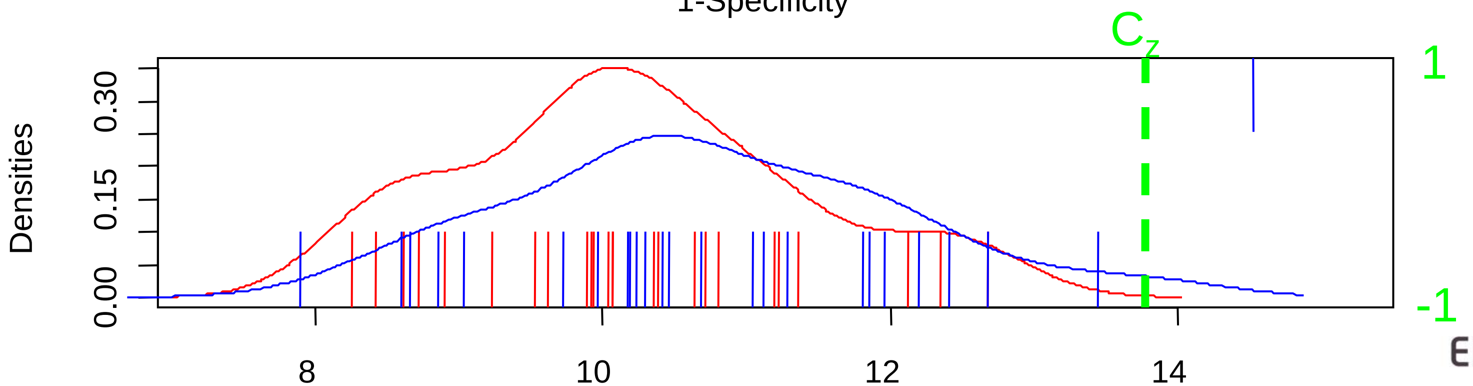


- Echantillonnage
  - *Positifs*
  - *Négatifs*



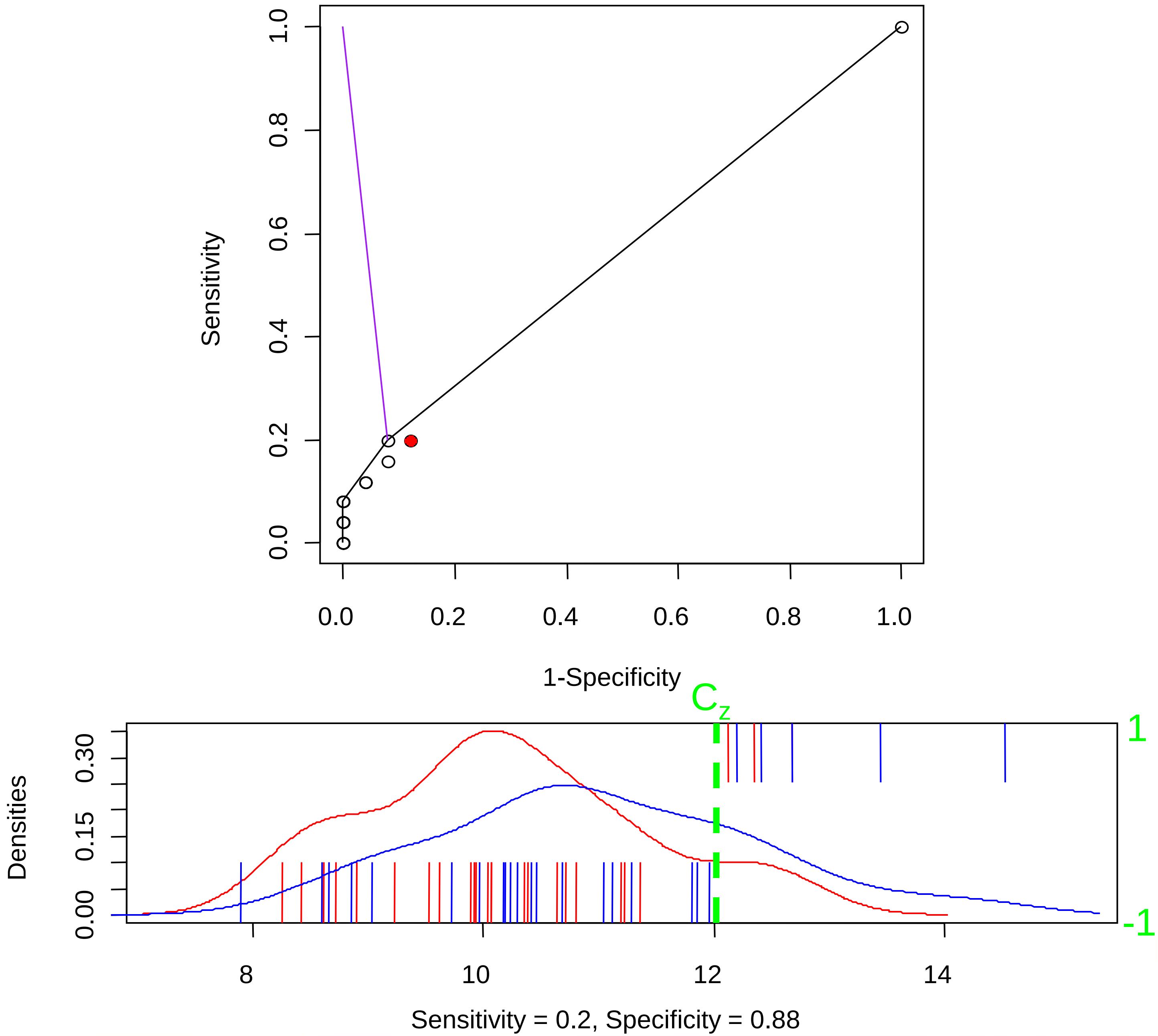
B. Gelein
M. Depecker



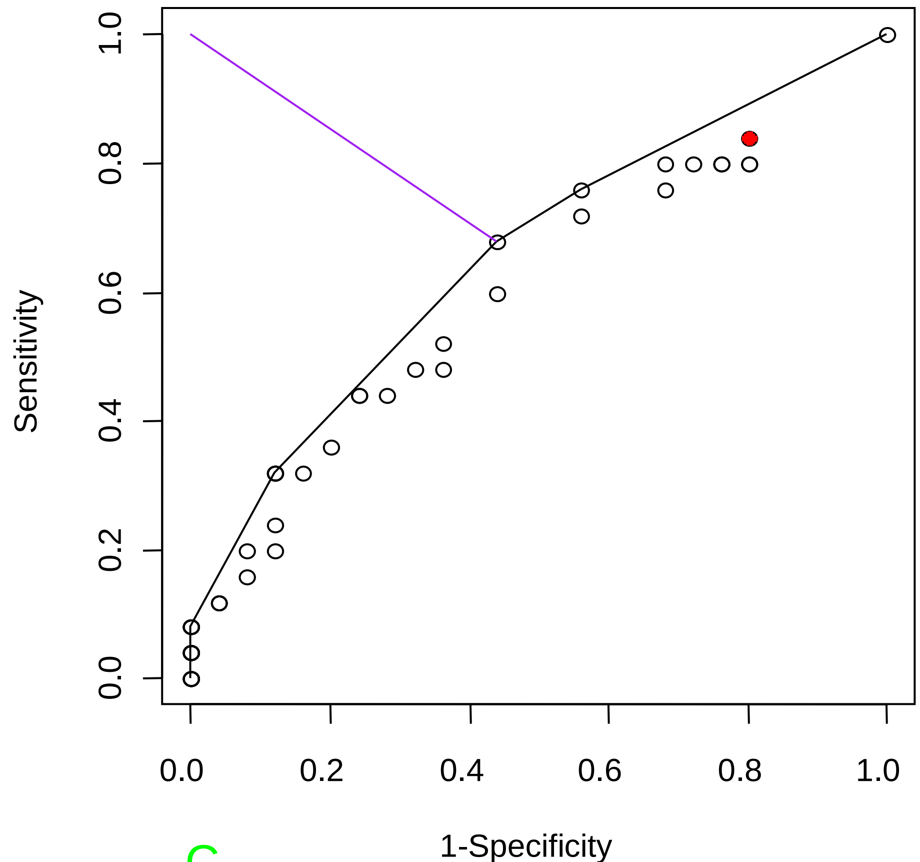


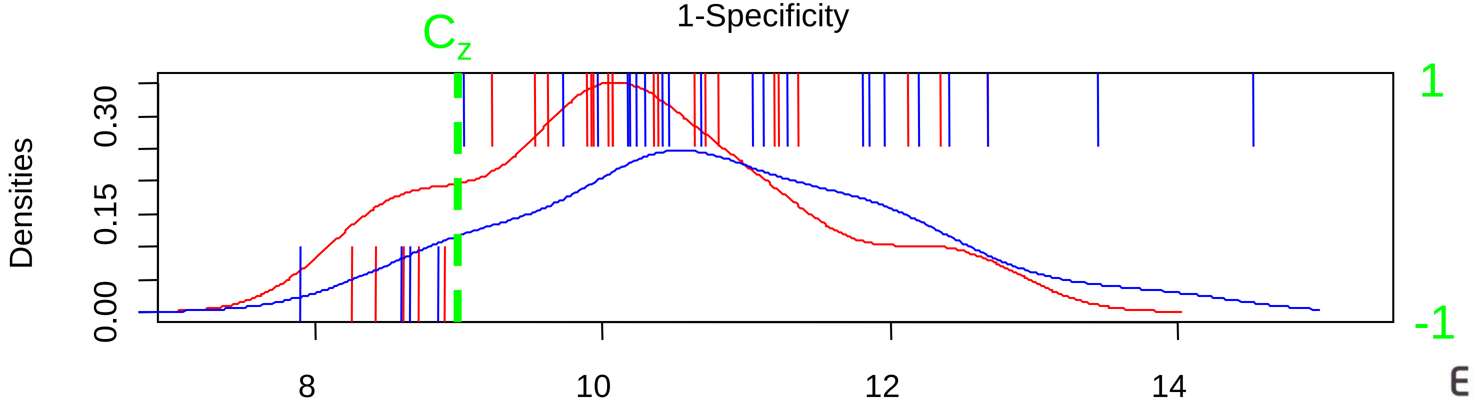
Sensitivity = 0.04, Specificity = 1

B. Gelein
M. Depecker



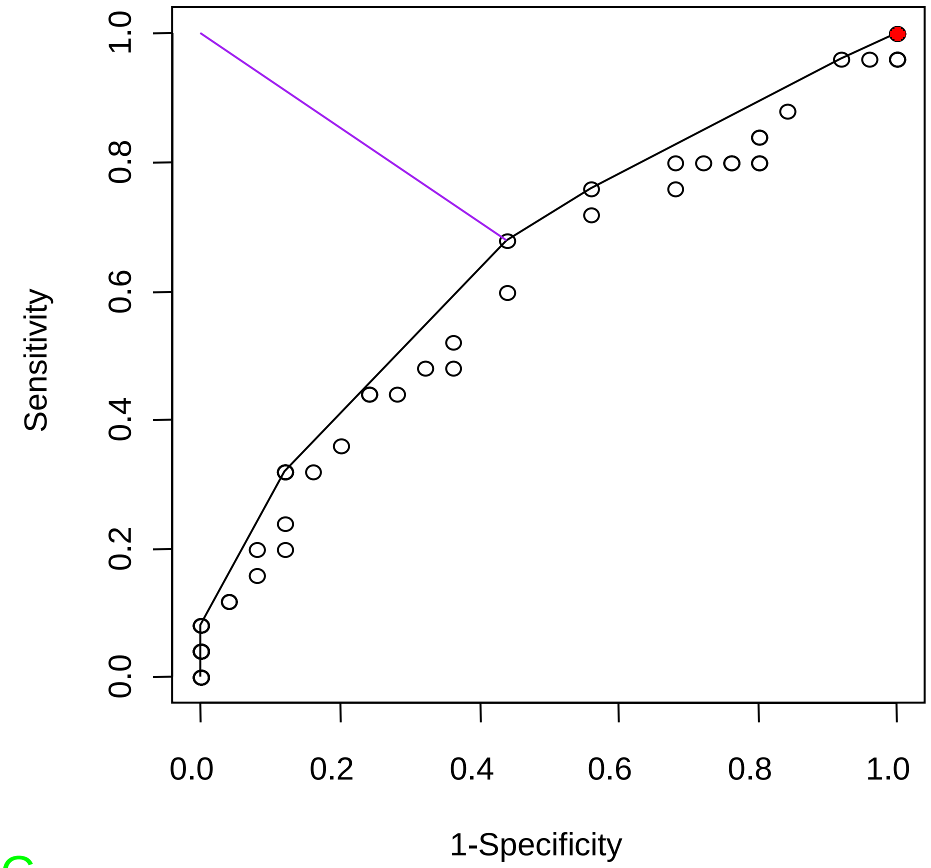
B. Gelein
M. Depecker

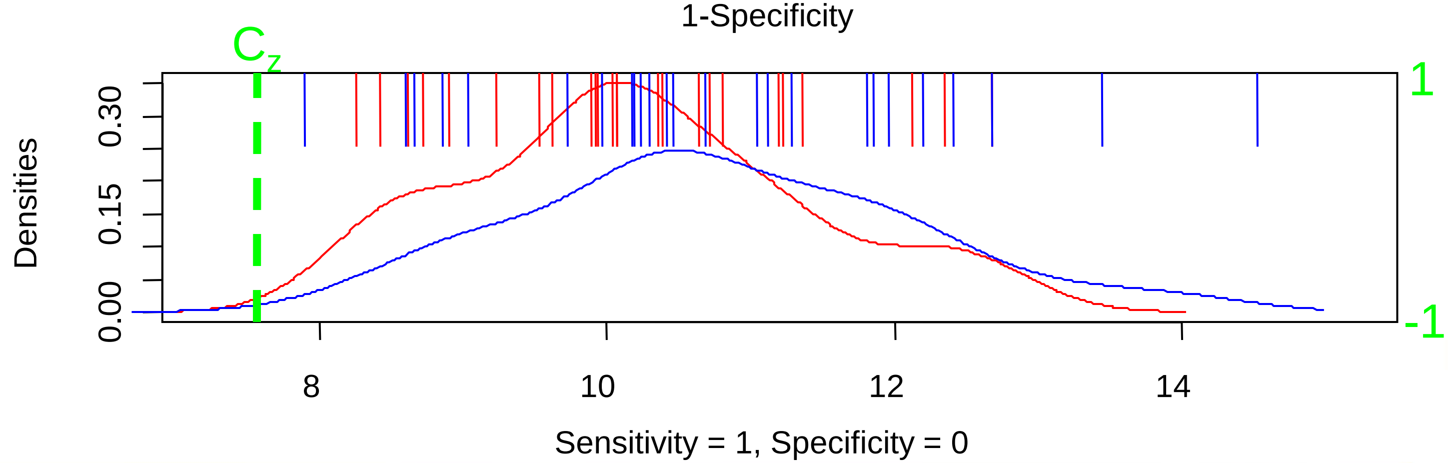




Sensitivity = 0.84, Specificity = 0.2

B. Gelein
M. Depecker

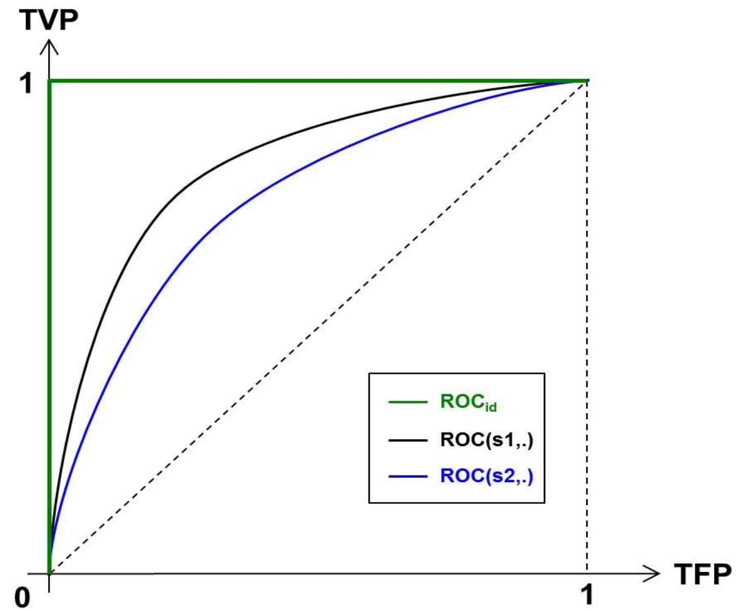

Sensitivity
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
1-Specificity


C_z
1
-1
Densities
0.00
0.15
0.30
8
10
12
14
Sensitivity = 1, Specificity = 0

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) : $\mathrm{TFP}_s(z) = \mathbb{P}\{s(X) \geq z \mid Y = -1\}$
- Taux de vrais positifs (TVP) : $\mathrm{TVP}_s(z) = \mathbb{P}\{s(X) \geq z \mid Y = +1\}$

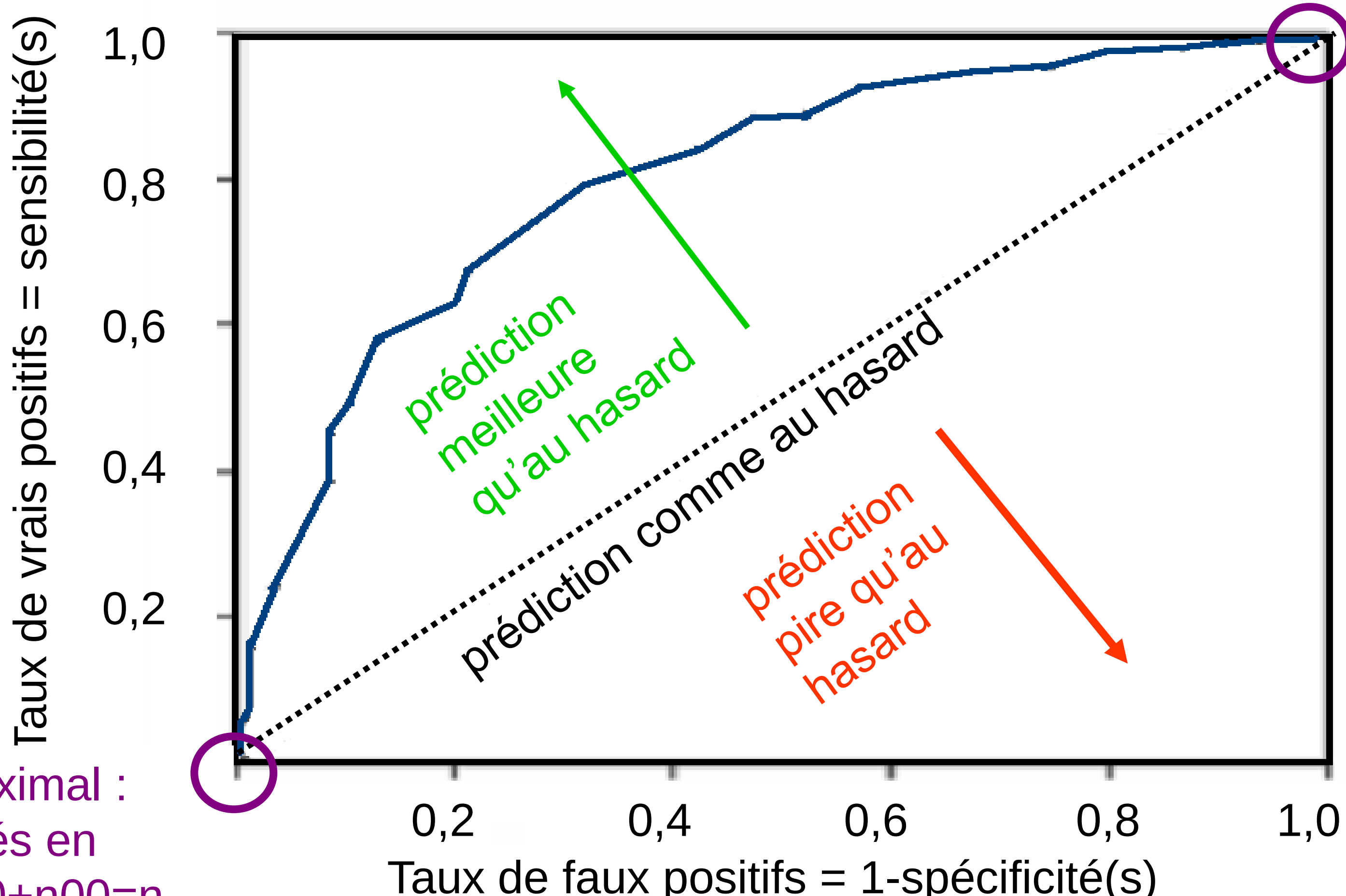
$$\mathrm{ROC} : \quad z \mapsto \left(\mathrm{TFP}_s(z), \mathrm{TVP}_s(z)\right)$$



2 – Courbe ROC

Propriétés de la ROC

Seuil z minimal : tous classés en positif n11+n01=n



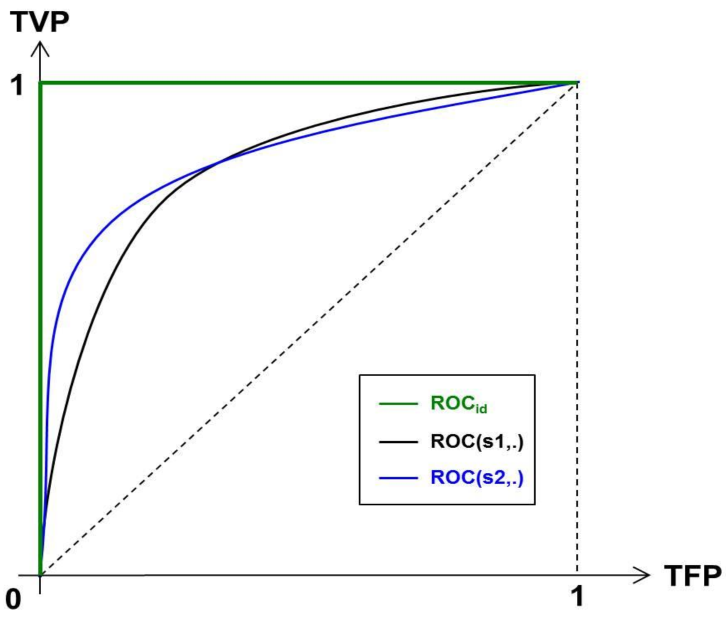
Seuil z maximal : tous classés en négatif n10+n00=n

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)**

Propriétés de la ROC



- La courbe ROC induit un **ordre partiel** sur l'ensemble des fonctions de score $\mathcal{S}$
- s_1 est plus performante que s_2 ***ssi***

$$\forall \alpha \in \left]0,1\right[,\ \mathrm{ROC}(s_1,\alpha) \geq \mathrm{ROC}(s_2,\alpha)$$

- La courbe ROC optimale correspond à la probabilité η

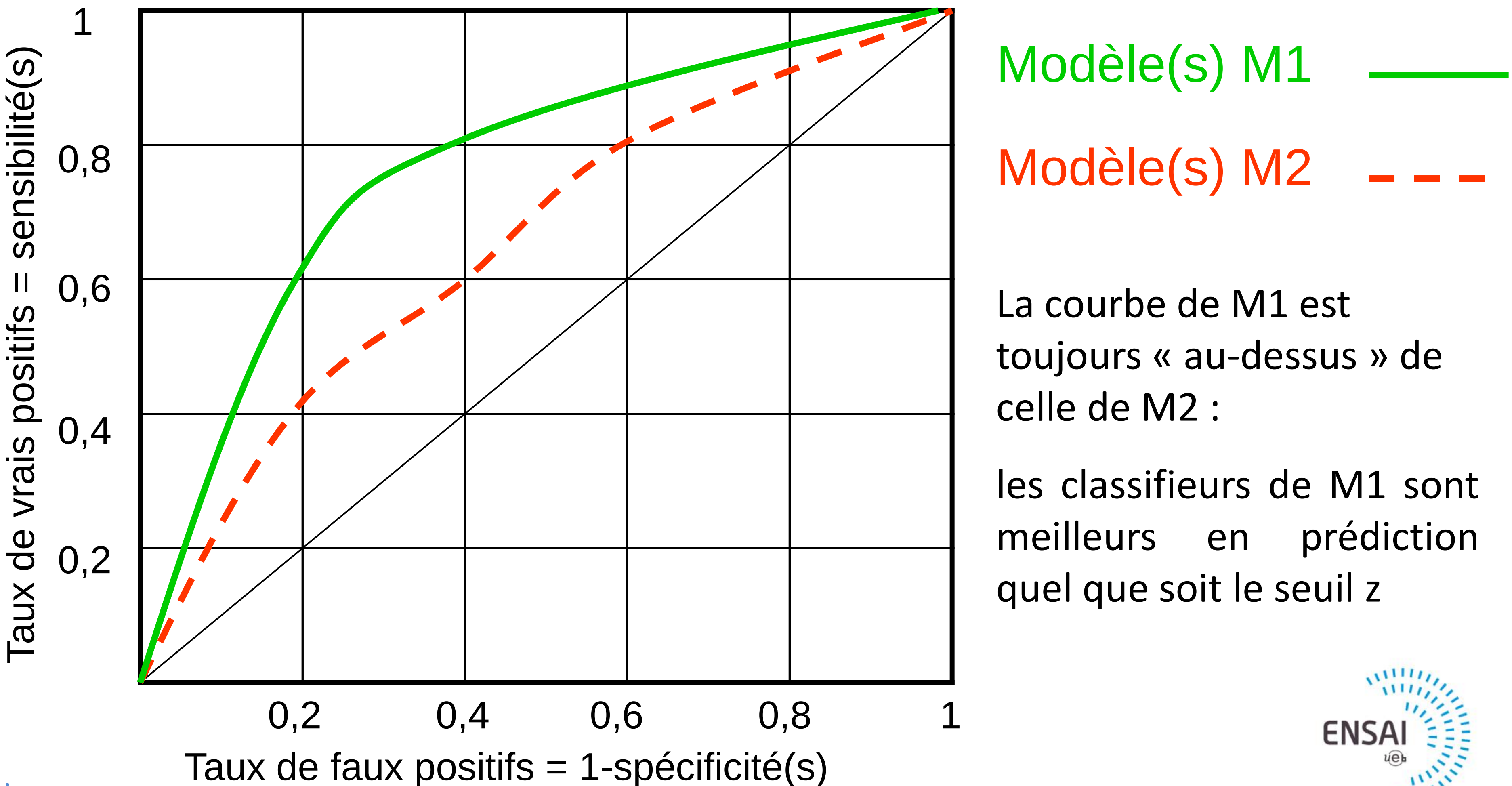
$$\forall s \in \mathcal{S}, \forall \alpha \in \left]0,1\right[,$$

$$\mathrm{ROC}^*(\alpha) = \mathrm{ROC}(\eta,\alpha) \geq \mathrm{ROC}(s,\alpha)$$

(argument de Neymann-Pearson)

où $\eta(x) = P(Y = +1 \mid X = x)$

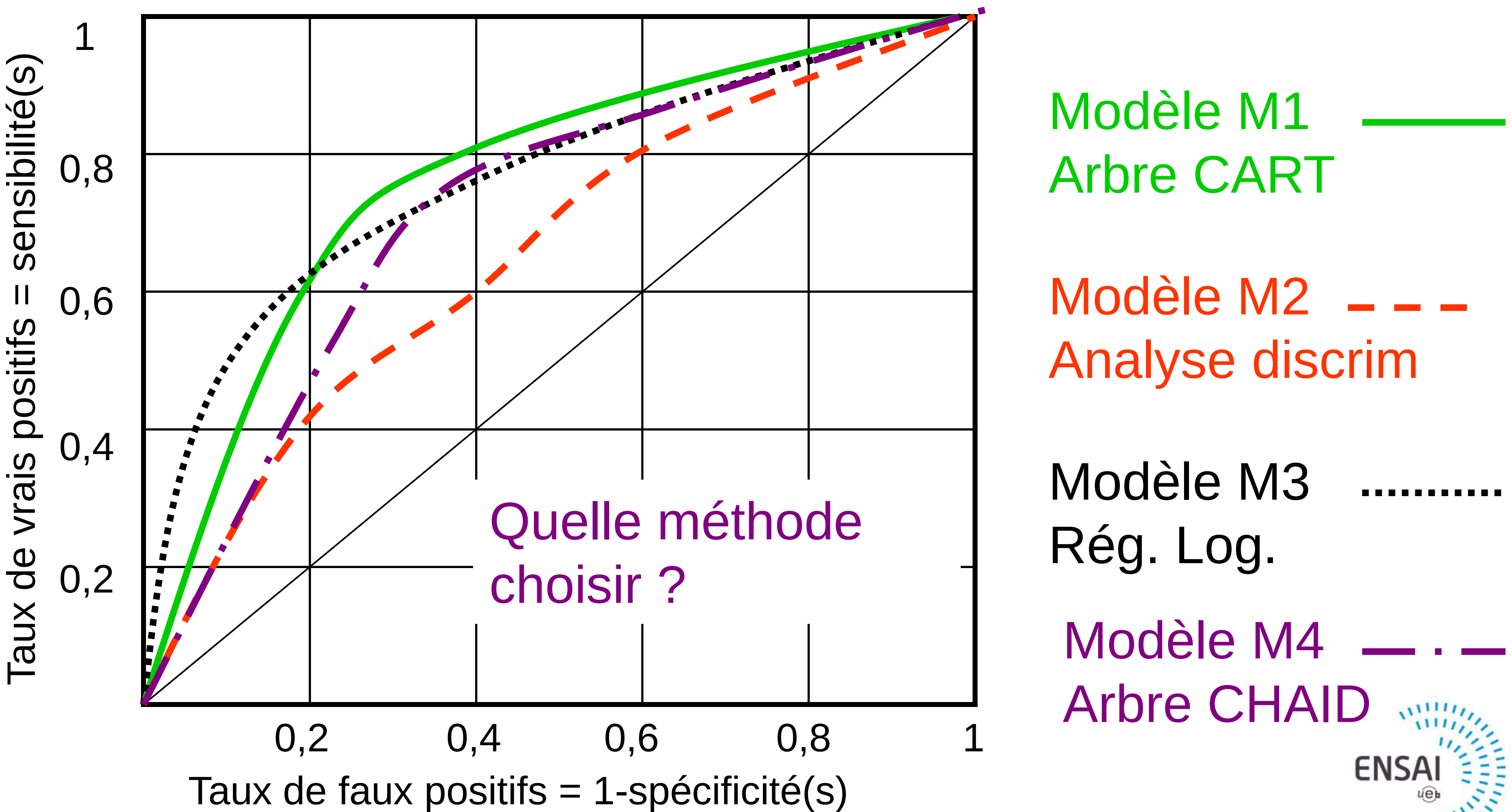
2 – Courbe ROC



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

2 – Courbe ROC

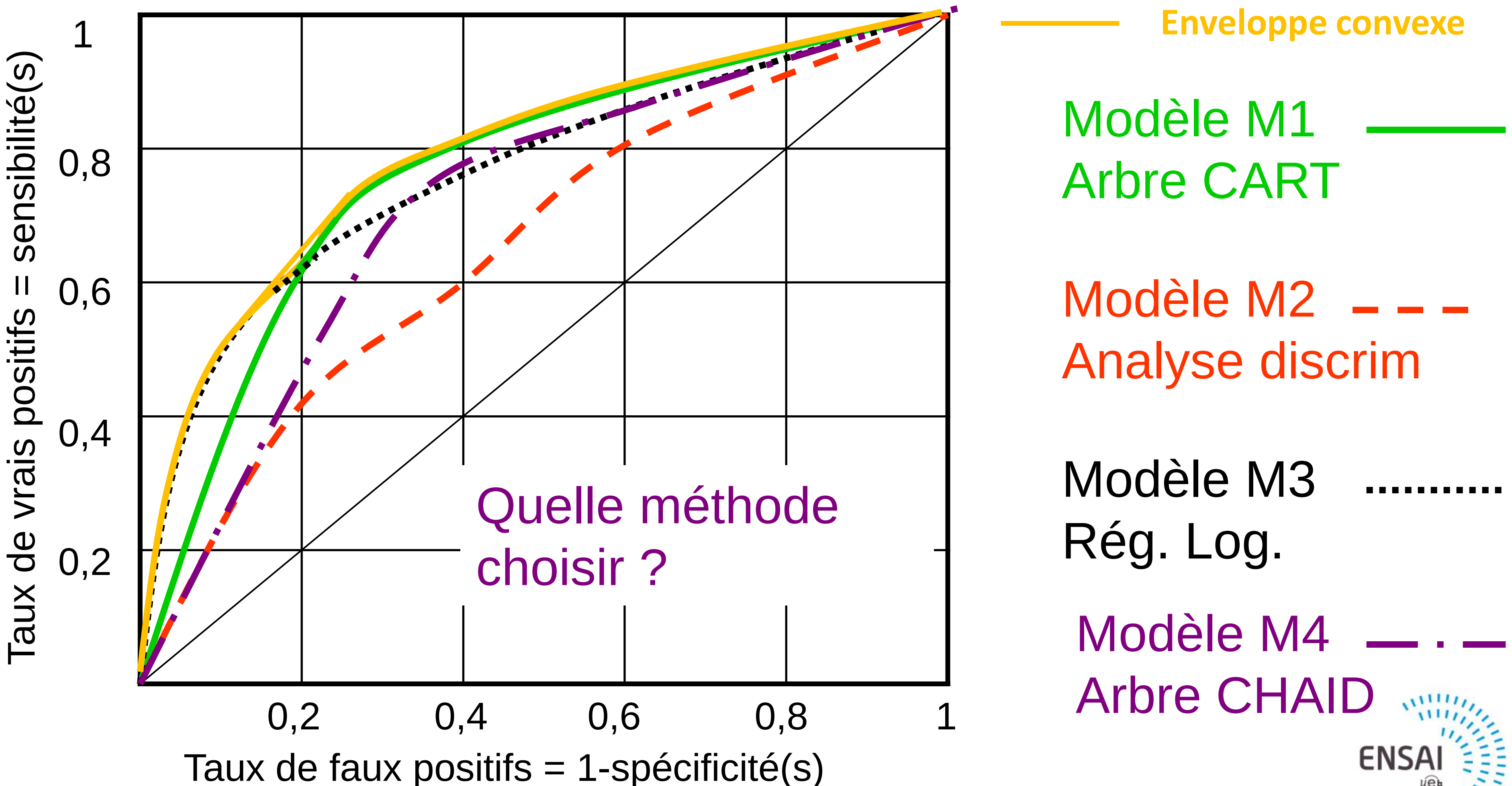

1
0,8
0,6
0,4
0,2
Taux de vrais positifs = sensibilité(s)
0,2
0,4
0,6
0,8
1
Taux de faux positifs = 1-spécificité(s)
Quelle méthode choisir ?
Modèle M1
Arbre CART
Modèle M2
Analyse discrim
Modèle M3
Rég. Log.
Modèle M4
Arbre CHAID

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

2 – Courbe ROC


1
0,8
0,6
0,4
0,2
Taux de vrais positifs = sensibilité(s)
0,2
0,4
0,6
0,8
1
Taux de faux positifs = 1-spécificité(s)
Quelle méthode choisir ?
Enveloppe convexe
Modèle M1
Arbre CART
Modèle M2
Analyse discrim
Modèle M3
Rég. Log.
Modèle M4
Arbre CHAID

2 – Courbe ROC

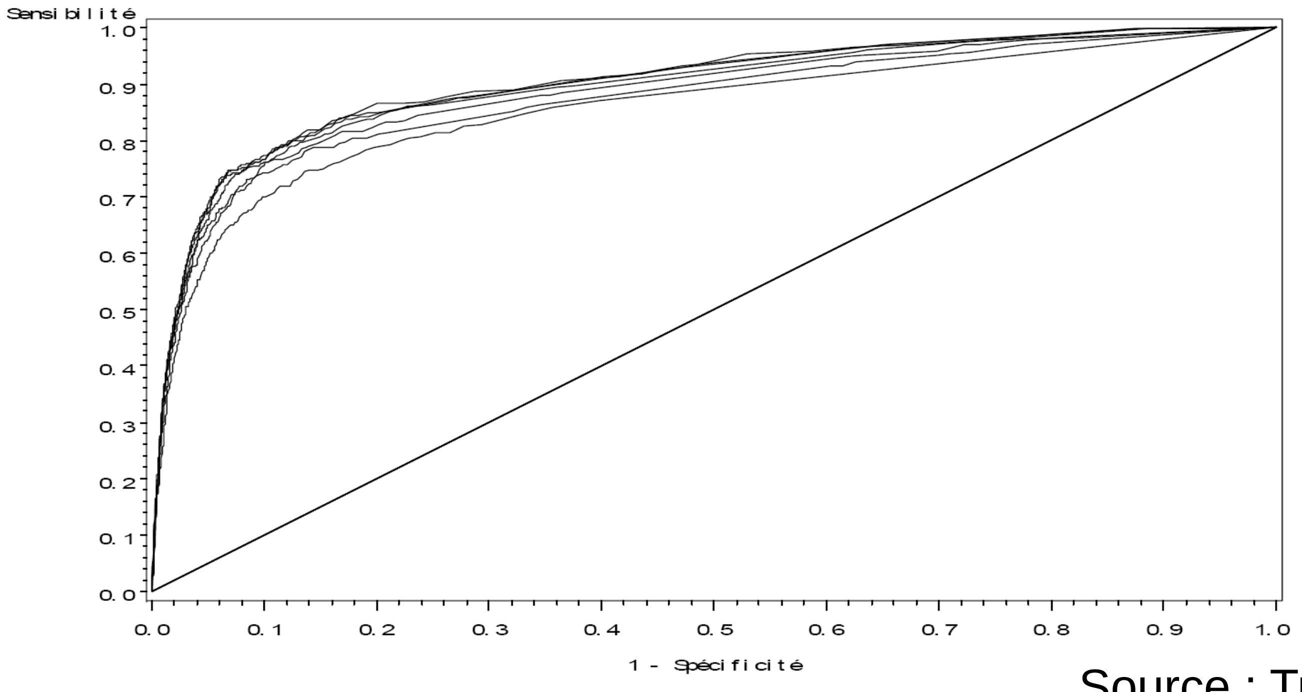
Enveloppe convexe – ou comment éliminer d'office les modèles les moins intéressants ?

- 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 éliminé.
  - M4 peut être meilleur que M3 dans certains cas, mais pour ces cas là, il s'avère moins bon que M2. M4 est donc éliminé.

2 – Courbe ROC

Autre usage de la courbe ROC

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

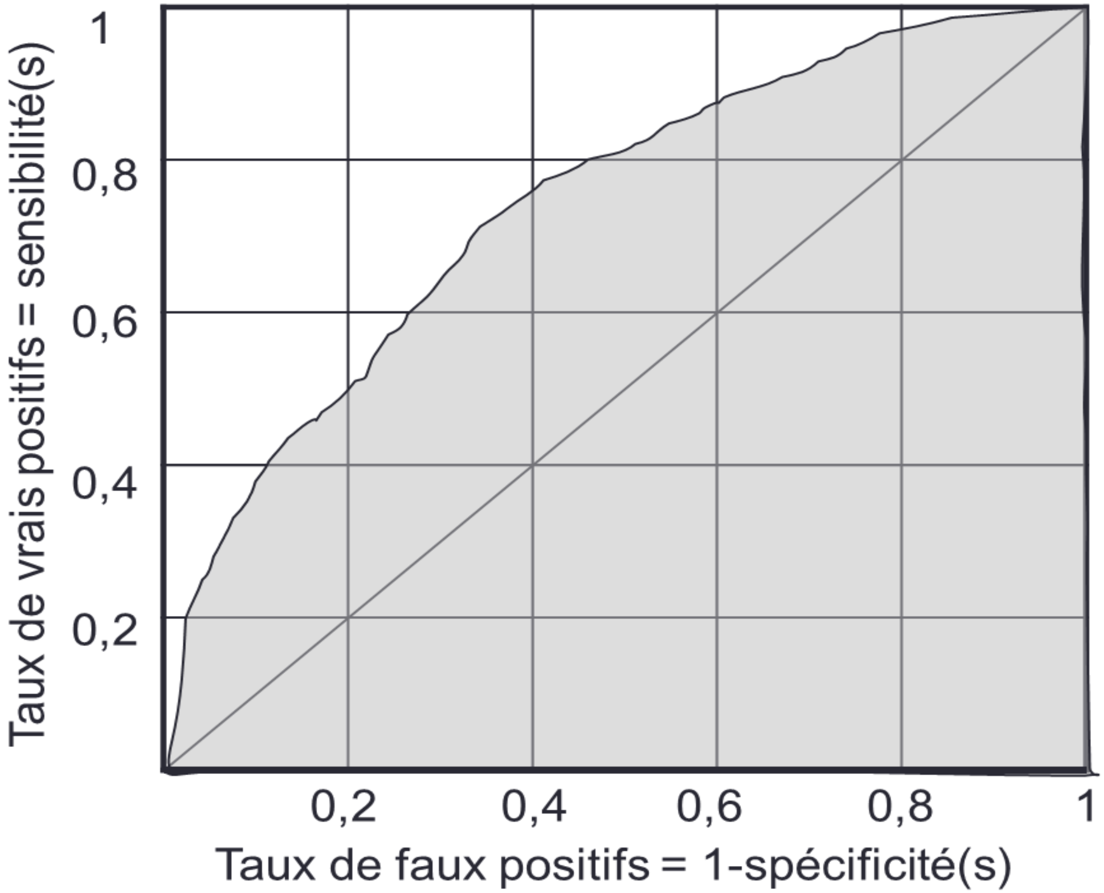


Source : Tufféry

3 – Aire sous la courbe ROC

Aire AUC sous la courbe ROC

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



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*

3 – Aire sous la courbe ROC

AUC - trois méthodes d'estimation

1. Méthode des trapèzes

2. Interprétation probabiliste: taux de paires concordantes

$\forall\,(X, X') \in \mathcal{X}^2$, $s \in \mathcal{S}$ et pour $p = \mathbb{P}\{Y = 1\}$,

$$\begin{aligned} \mathrm{AUC}(s) &= \mathbb{P}\left\{s(X) > s(X') \mid (Y, Y') = (+1, -1)\right\} \\ &+ \frac{1}{2} \cdot \mathbb{P}\left\{s(X) = s(X') \mid (Y, Y') = (+1, -1)\right\}. \\ &= 1 - \frac{1}{2p(1-p)} \cdot \mathbb{P}\left\{(s(X) - s(X'))(Y - Y') < 0\right\} \end{aligned}$$

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

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

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* :

$$AUC = \frac{U}{n1 \times n2}$$

- *U* est une statistique de test non-paramétrique permettant d'évaluer l'homogénéité entre deux populations où R_1 (resp. R_2) est la somme des rangs des individus de G_1 (resp. G_2), et

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

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

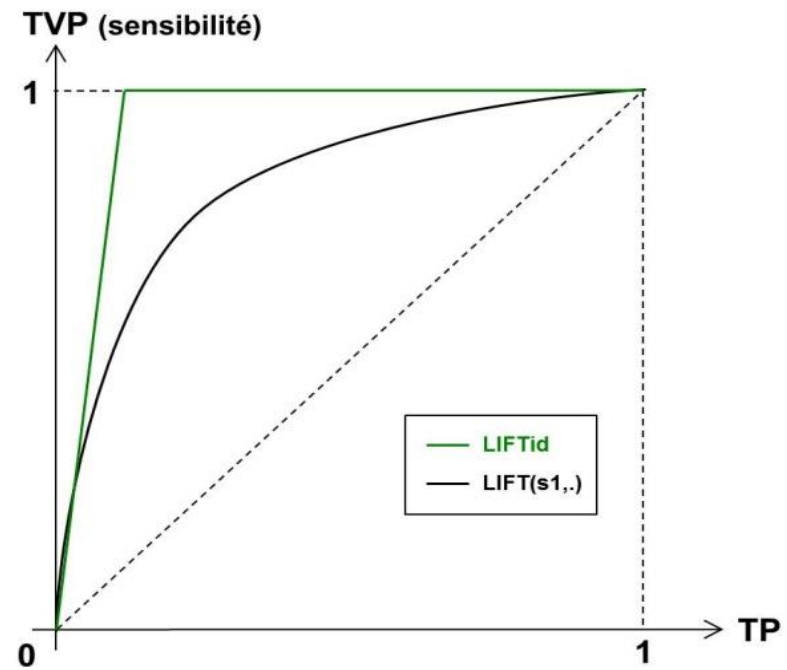
4 – Courbe LIFT

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)



$$LIFT : \quad z \mapsto \left(\mathrm{TP}_s(z), \mathrm{TVP}_s(z)\right)$$

B. Gelein
M. Depecker

4 – Courbe LIFT

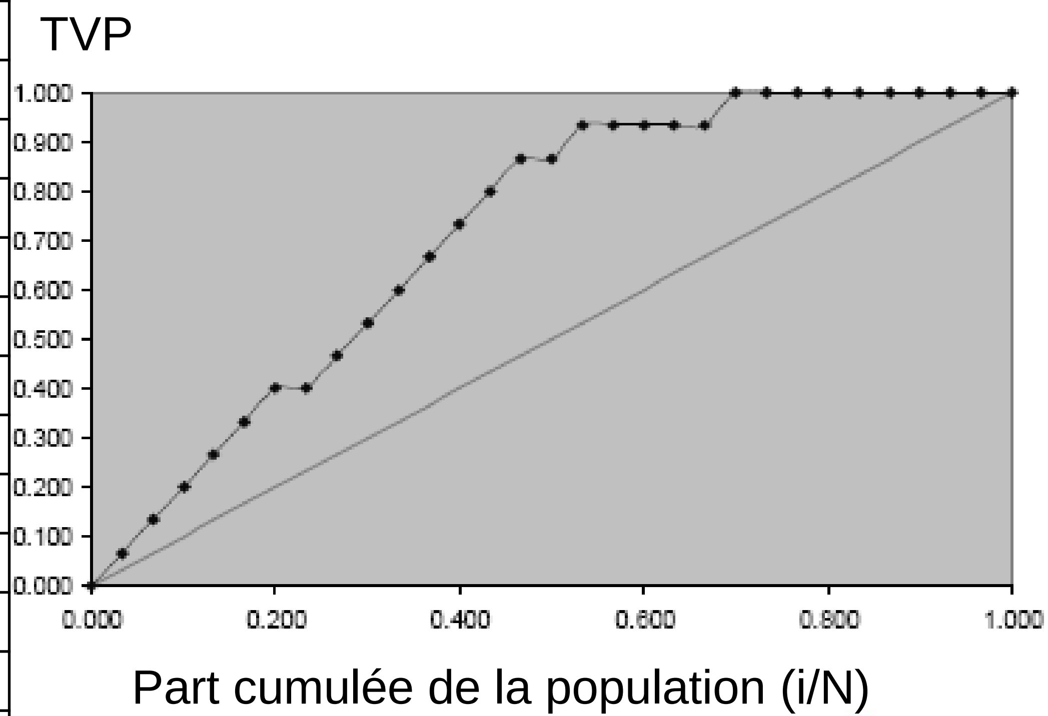
Courbe LIFT ou courbe de gain

- 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

Individu	Y observé	Score	Part cum. de Population	TVP
			0	0.000
1	1	1.000	0.033	0.067
2	1	1.000	0.067	0.133
3	1	0.999	0.100	0.200
4	1	0.999	0.133	0.267
5	1	0.998	0.167	0.333
6	1	0.992	0.200	0.400
…	…	…	…	…
19	0	0.294	0.633	0.933
20	0	0.109	0.667	0.933
21	1	0.073	0.700	1.000
22	0	0.035	0.733	1.000
23	0	0.024	0.767	1.000
24	0	0.016	0.800	1.000
25	0	0.015	0.833	1.000
26	0	0.009	0.867	1.000
27	0	0.004	0.900	1.000
28	0	0.003	0.933	1.000
29	0	0.002	0.967	1.000
30	0	0.000	1.000	1.000

Courbe LIFT

Les données sont triées selon les scores décroissants

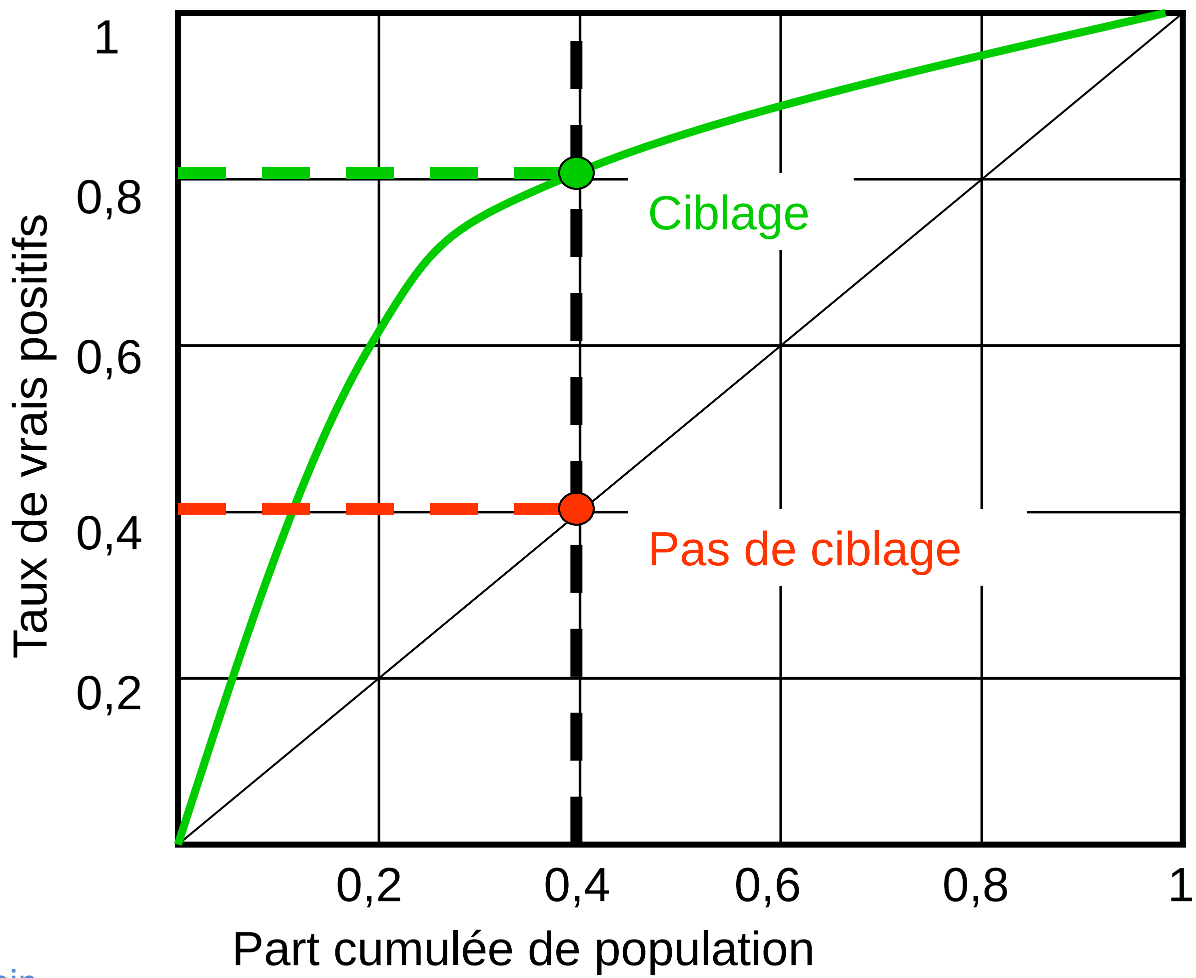


N=30 et N(Y=1)=15

Source : R. Rakotomalala

B. Gelein
M. Depecker

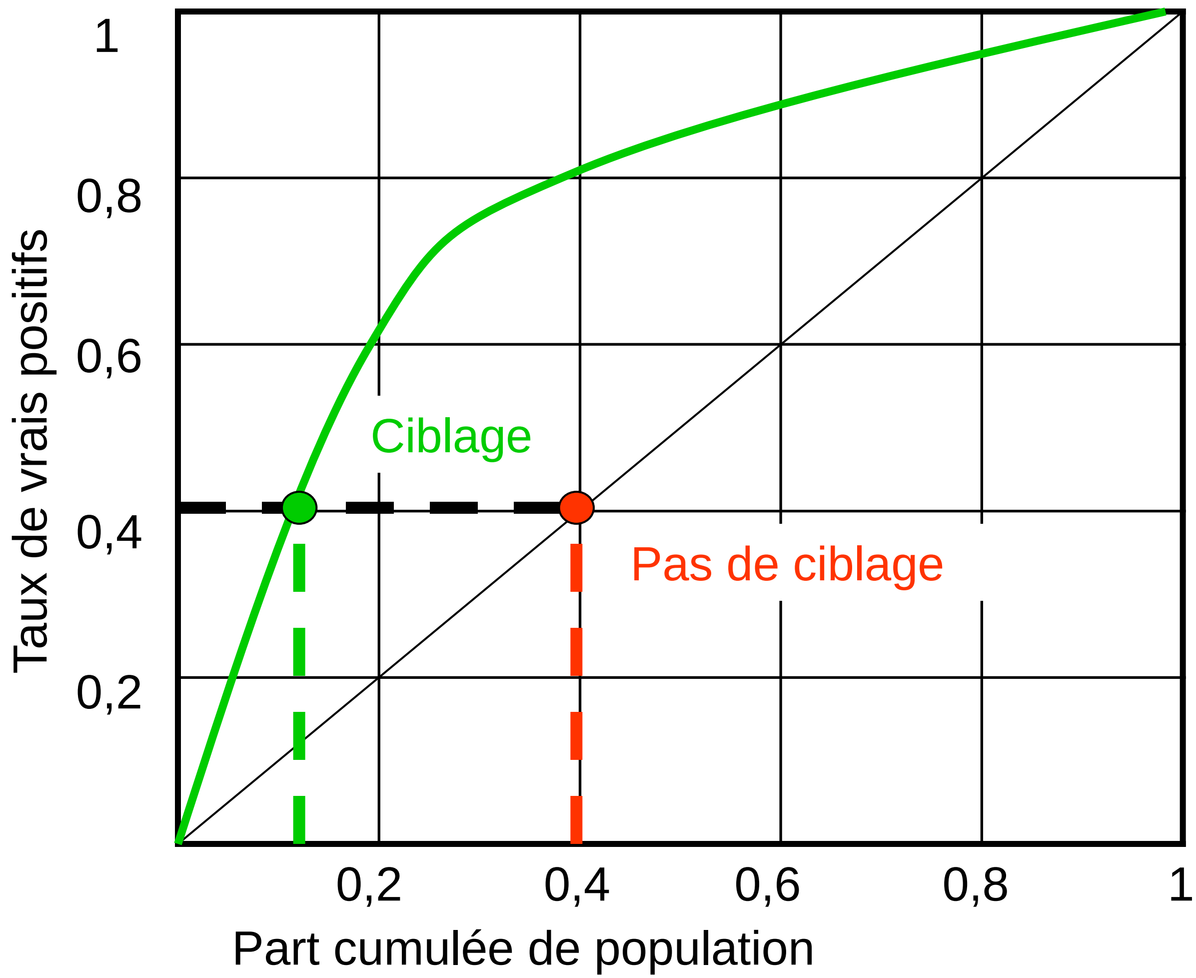
4 – Courbe LIFT



Optique
« budget fixé »

B. Gelein
M. Depecker

4 – Courbe LIFT

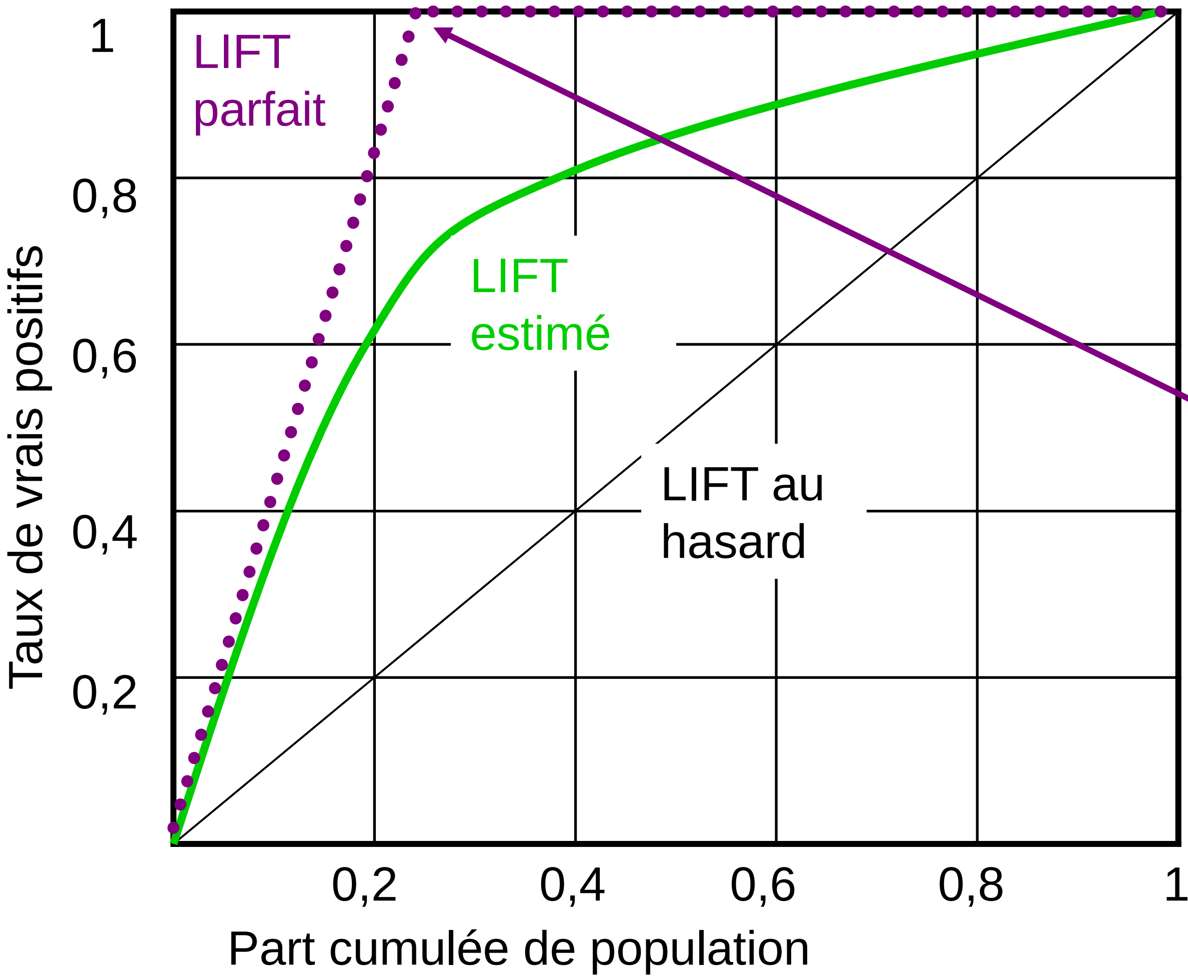


Objectif =
part de Y=1

Exemple : « part de marché »

B. Gelein
M. Depecker

4 – Courbe LIFT



Ciblage parfait :

Les premiers individus de la base ont tous Y=1

B. Gelein
M. Depecker

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

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

5 – Aire sous la courbe LIFT

Lien entre courbe de LIFT et courbe ROC

- Cas particuliers :
  - AUC = 1 ⇔ AUL = p/2 + (1 – p) = 1 – p/2
  - AUC = 0,5 ⇔ 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)

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

  Difficulté : elle doit être lue *relativement* à la LIFT idéale

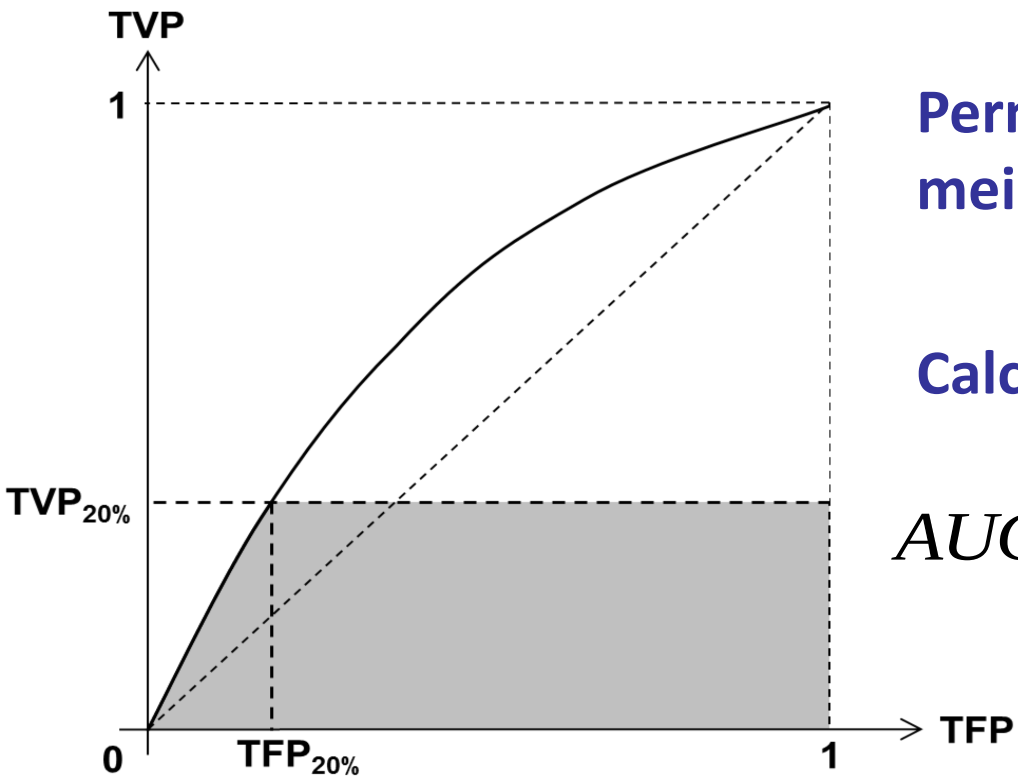
Conclusion
6.1 – Avantages et Limites

AUC et AUL

- 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**

Conclusion
6.2 – Alternatives

Exemple: l'AUC partielle



Permet de se focaliser sur les x% meilleures observations

Calcul simple :

$$AUC_{tronquée\ x\%} + \left(1 - TFP_{x\%}\right) \times TVP_{x\%}$$

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