

Probability

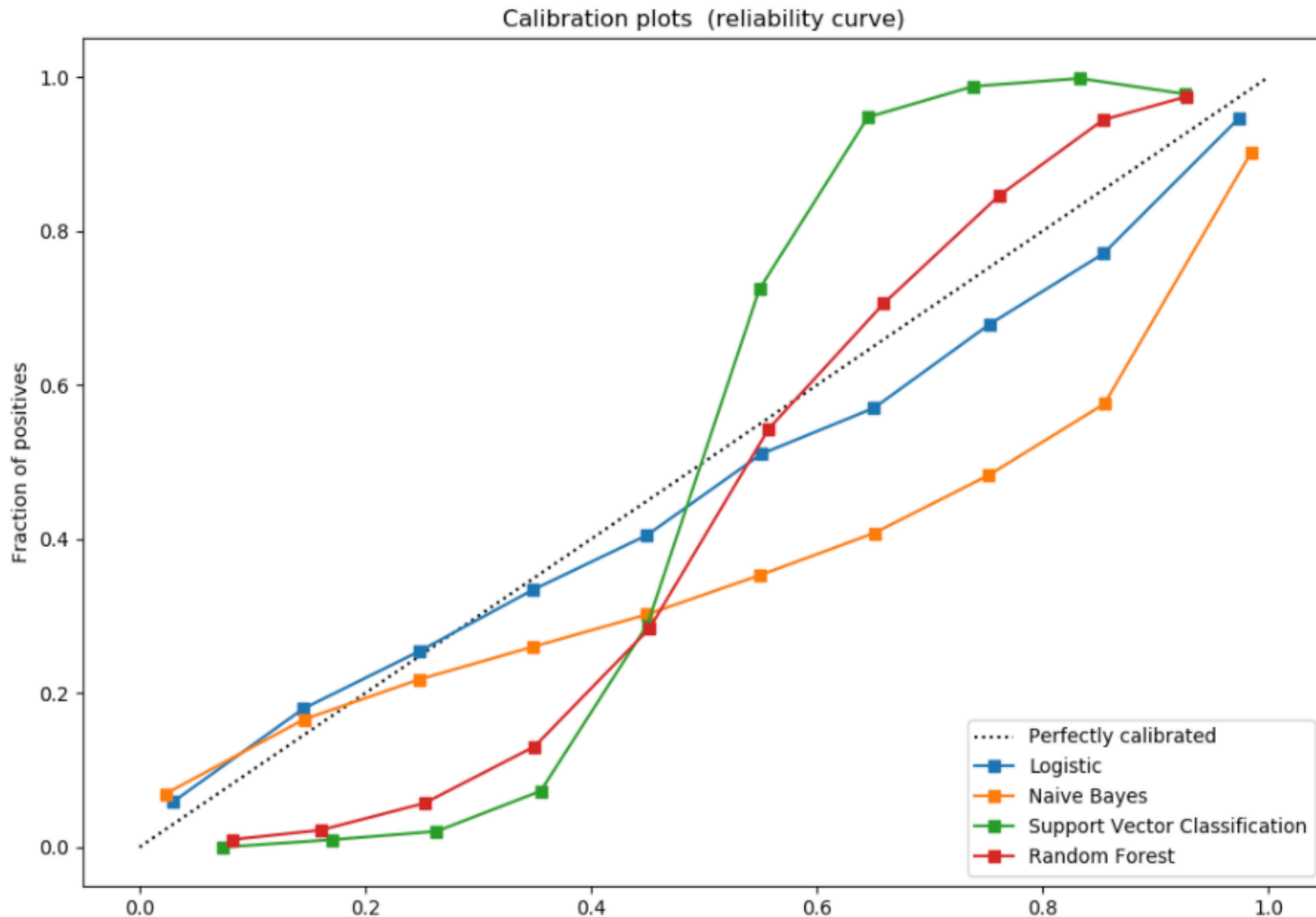
Calibration

Сортируем предсказания модели бинарной классификации и делим на бины

Калибровка = в бине, где средний скор 0.85 должны быть 85% True Positive

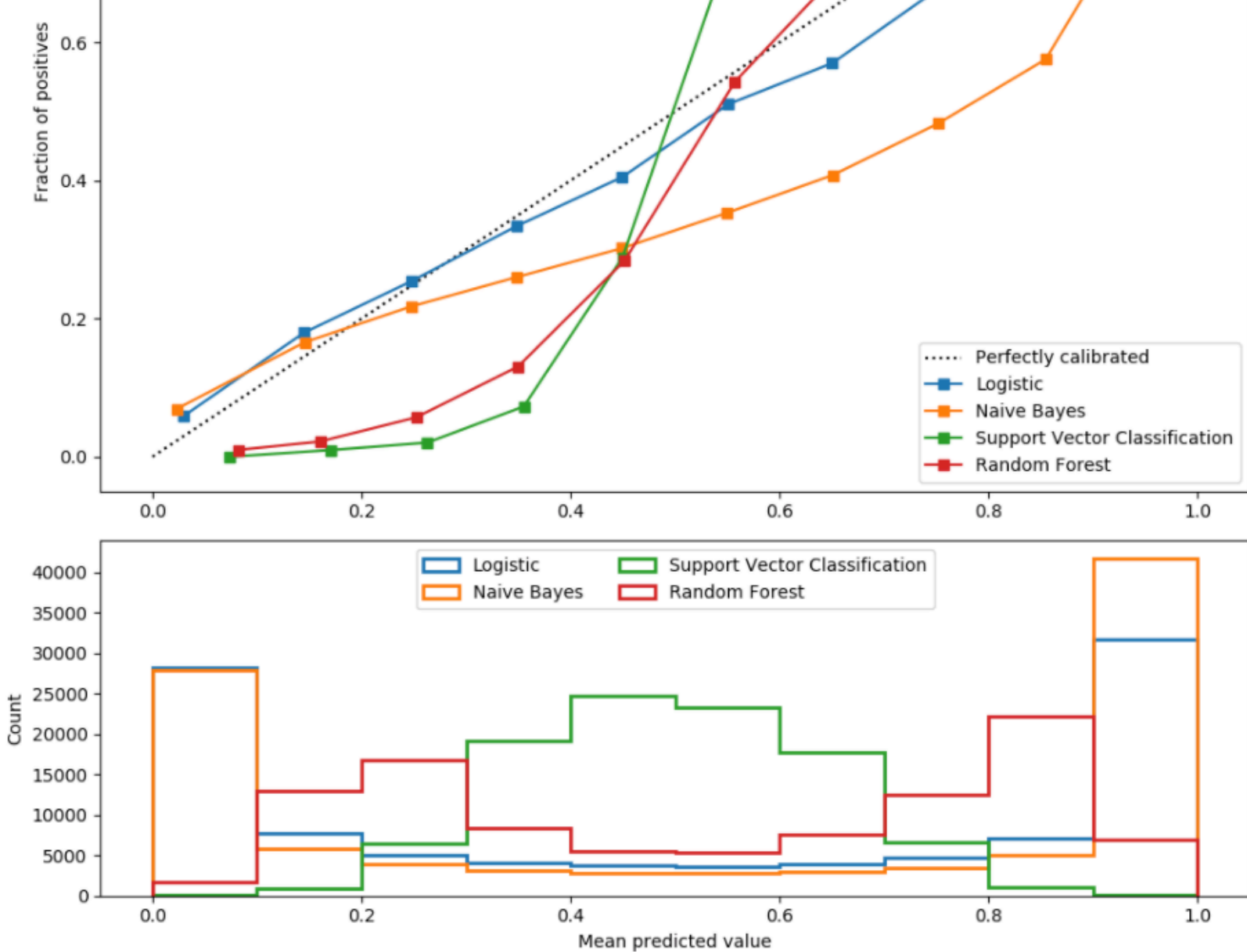
ось X:
mean(predict_proba) в бине
«предсказанная вероятность
единичек в бине»

ось Y:
доля TP в бине
«настоящая вероятность
единичек в бине»



Диагональная пунктирная линия = идеальная калибровка
[График](#) на самом деле квадратный, просто ось X растянута

Различия
хорошо видны
на гистограммах
скорев



Как происходит калибровка

- Обучаем дополнительную модель (regressor), которая пытается при данной `predict_proba` предсказать вероятность

$$P(y = 1 \mid \text{predict_proba})$$

- Для этого придется выделить дополнительный набор данных (`X_calibrate`, `y_calibrate`)

isotonic regression

calibration

Строим ступенчатую
неубывающую функцию m

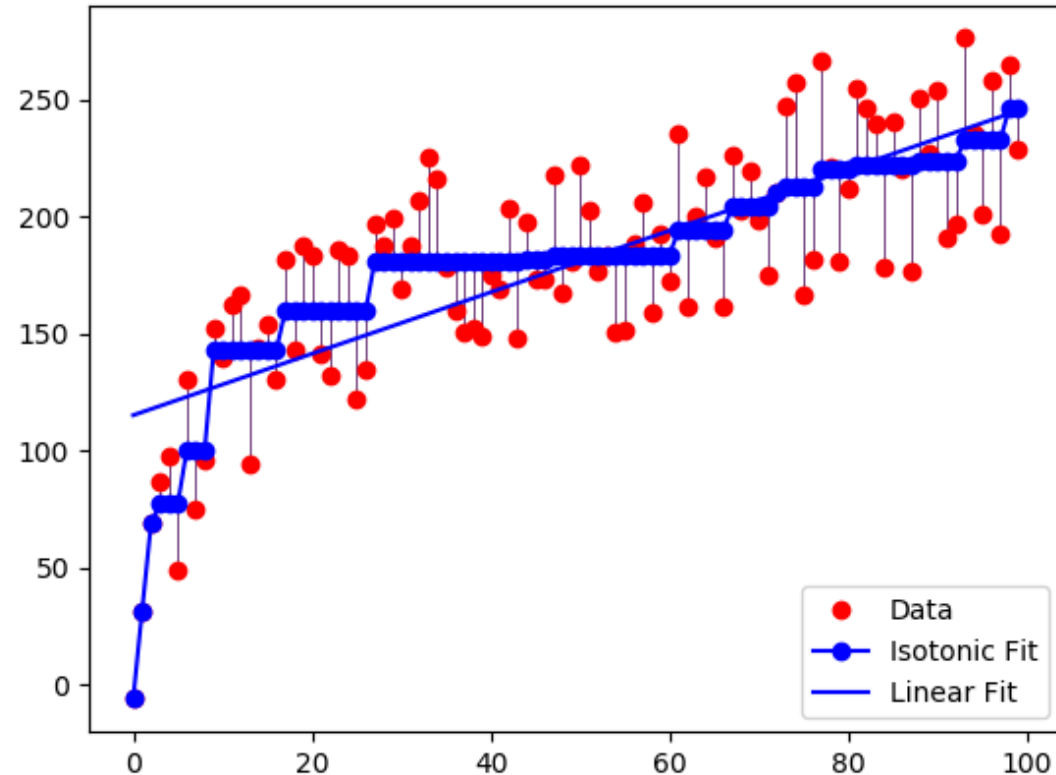
$$\hat{m} = \operatorname{argmin} \sum_i w_i (y_i - \hat{y}_i)^2$$

\hat{y}_i - ответ алгоритма,
по которому минимизируем ф-ию

y_i - таргет

w_i - веса

Isotonic regression



IsotonicRegression produces a series of predictions \hat{y}_i for the training data which are the closest to the targets y in terms of mean squared error. These predictions are interpolated for predicting to unseen data. The predictions of **IsotonicRegression** thus form a function that is piecewise linear:

sigmoid

calibration

Статья

Predicting Good Probabilities with Supervised Learning, A. Niculescu-Mizil & R. Caruana, ICML 2005

Считаем сигмоиду над $Af + B$

$$P(y = 1|f) = \frac{1}{1 + \exp(Af + B)}$$

f – ответ обученного алгоритма

where the parameters A and B are fitted using maximum likelihood estimation from a fitting training set (f_i, y_i) . Gradient descent is used to find A and B such that they are the solution to:

$$\operatorname{argmin}_{A,B} \left\{ - \sum_i y_i \log(p_i) + (1 - y_i) \log(1 - p_i) \right\}, \quad (2)$$

where

$$p_i = \frac{1}{1 + \exp(Af_i + B)} \quad (3)$$

Brier score loss

Definition [\[edit\]](#)

The most common formulation of the Brier score is

$$BS = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (f_t - o_t)^2$$

in which f_t is the probability that was forecast, o_t the actual outcome of the event at instance t (0 if it does not happen and 1 if it does happen)

- [Лежит](#) в $[0, 1]$
- Чем меньше, тем лучше

`sklearn.metrics.brier_score_loss`

```
sklearn.metrics.brier_score_loss(y_true, y_prob, *, sample_weight=None, pos_label=None)
```

[\[source\]](#)

Compute the Brier score.