Постановка задачи

Дано: задача классификации.

$$X^\ell = \{x_1, \dots, x_\ell\}$$
 — выборка;

$$y_i = y(x_i) \in \{0,1\}$$
, $i = 1, \dots, \ell$ — известные бинарные ответы.

 $b\colon X \to \mathbb{R}$ — алгоритм, оценивающий принадлежность x к классу 1.

Вопрос:

Как измерить качество b(x) на выборке X^{ℓ} ?

Откуда берутся оценки принадлежности?

Как правило, классификатор имеет вид

$$a(x) = [b(x) > t].$$

- b(x) оценка принадлежности к классу 1
- t порог классификации

Откуда берутся оценки принадлежности?

Линейный классификатор:

$$a(x) = [\langle w, x \rangle > 0].$$

[здесь идет картинка с разделяющей прямой; скалярное произведение оценивает расстояние; если объект близко к ней, то мы не уверены, если далеко, то уверены в ответы]

Откуда берутся оценки принадлежности?

Метод k ближайших соседей:

$$a(x) = \left[\sum_{i=1}^{k} [y^{(i)} = 1] > k/2\right].$$

[здесь идет визуализация тоже: если среди соседей объекта все относятся к одному классу, то он уверен в классификации и выдает высокую оценку; если же среди соседей встречаются оба класса, то оценка понижается]

Зачем нужны оценки принадлежности?

Пример: кредитный скоринг.

- нужно предсказать, вернет ли клиент кредит;
- сортируем клиентов по оценке вероятности возврата b(x);
- банк получает ранжированный список;
- порог выбирается в зависимости от стратегии банка;
- порог может многократно пересматриваться.

Зачем нужны оценки принадлежности?

Пример: задача определения самолетов противника.

- b(x) оценивает вероятность того, что самолет принадлежит противнику;
- классификатор a(x) = [b(x) > 0.9];
- precision = 0.2, recall = 0.7;
- как понять, в чем проблема неправильном пороге или плохой функции b(x)?

PR-кривая

① Отсортируем объекты по возрастанию оценки b(x):

$$b\left(x_{(1)}\right)\leqslant\ldots\leqslant b\left(x_{(\ell)}\right).$$

Переберем все пороги классификации, начав с максимального:

$$t_{\ell} = b(x_{(\ell)}),$$

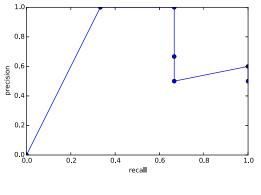
$$...$$

$$t_{1} = b(x_{(1)}),$$

$$t_{0} = b(x_{(1)}) - \varepsilon.$$

- Для каждого порога посчитаем точность и полноту.
- Нанесем соответствующую точку в осях «полнота-точность».
- Соединим точки, получив Precision-Recall-кривую.

PR-кривая



PR-кривая

Свойства:

- Левая точка: всегда (0,0) (все объекты относим к классу 0);
- ullet Правая точка: $(1,\ell_+/\ell)$, ℓ_+ число объектов класса 1 в выборке;
- ullet Если выборка идеально разделима, то кривая пройдет через точку (1,1);
- Чем больше площадь под кривой, тем лучше.

AUC-PRC (Area Under Precision-Recall curve) — мера качества для b(x).

ROC-кривая

ROC — «reciever operating characteristic».

• по оси X: False Positive Rate, доля ошибочных положительных классификаций:

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

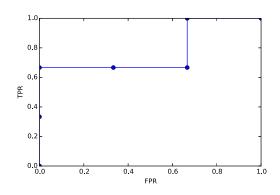
 $1 - \mathsf{FPR}$ называется специфичностью алгоритма.

• по оси Y: True Positive Rate, доля правильных положительных классификаций:

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

TPR называется *чувствительностью* алгоритма.

ROC-кривая



ROC-кривая

Свойства:

- Левая точка: всегда (0,0) (все объекты относим к классу 0);
- Правая точка: всегда (1,1) (все объекты относим к классу 1);
- Если выборка идеально разделима, то кривая пройдет через точку (1,0);
- Площадь меняется от 1/2 до 1;
- Чем больше площадь под кривой, тем лучше.

AUC-ROC (Area Under ROC-curve) — мера качества для b(x).

ROC-кривая:

$$\mathsf{FPR} = \frac{\mathsf{FP}}{\mathsf{FP} + \mathsf{TN}}, \qquad \mathsf{TPR} = \frac{\mathsf{TP}}{\mathsf{TP} + \mathsf{FN}}.$$

- Метрики качества нормируются на размеры классов, ROC-кривая не изменится при перемене соотношения классов.
- Интерпретация: AUC-ROC равен вероятности того, что случайно взятый объект класса 1 получит оценку выше, чем случайно взятый объект класса 0.
- Имеет проблемы при сильном дисбалансе классов.

Сравнение

PR-кривая:

$$\mathsf{precision} = \frac{\mathsf{TP}}{\mathsf{TP} + \mathsf{FP}}, \qquad \mathsf{recall} = \frac{\mathsf{TP}}{\mathsf{TP} + \mathsf{FN}}.$$

- Точность нормируется на число положительных прогнозов, изменится при перемене соотношения классов.
- Максимально возможная площадь под PR-кривой зависит от соотношения классов.
- Хорошо подходит для измерения качества при сильном дисбалансе классов.

Сравнение

- 100 объектов класса 1;
- 1.000.000 объектов класса 0;
- Ранжирование: 50.000 объектов класса 0, затем 100 объектов класса 1, затем все остальные объекты класса 0;

Метрики качества:

- AUC-ROC: 0.95;
- AUC-PRC: 0.001.

Почему так получается?

- Выберем порог, при котором первые 50.095 объектов относятся к классу 1;
- TPR = 0.95, FPR = 0.05;
- precision = 0.0019, recall = 0.95.

Заключение

- Работать с оценками принадлежности может быть полезнее, чем с бинарными ответами
- Две основные метрики качества: AUC-PRC и AUC-ROC
- AUC-ROC не зависит от соотношения классов