

**Skriptname:** ROC\_pAUC7.jsl  
**Datum:** 10.09.2007

**JMP-Version:** JMP 7  
**Download:** ROC.zip

## Funktion

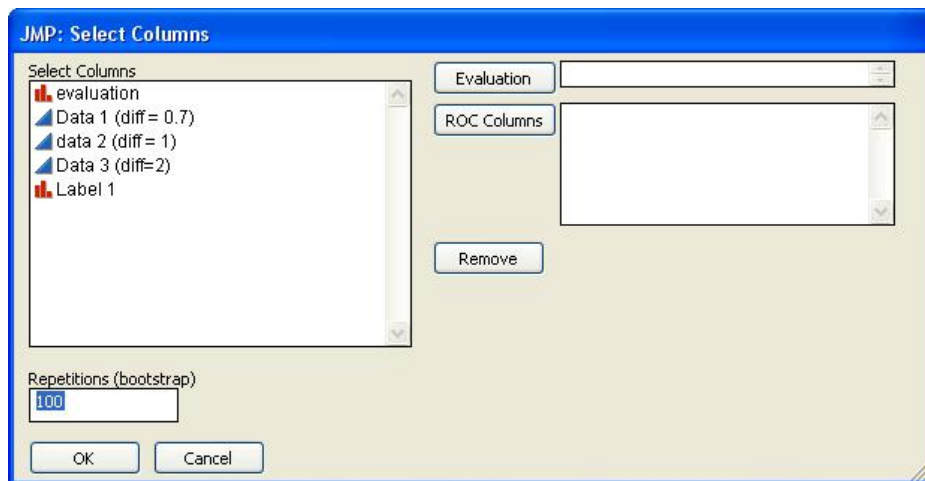
Das Skript erstellt ROC-Kurven mit Konfidenzbändern, berechnet (gewichtete) Cutoff-Punkte und (partial) Area under the Curve (AUC, pAUC).

## Beschreibung

Zur Verwendung dieses Skripts benötigt man eine JMP-Datentabelle mit Daten für eine ROC-Kurve („Receiver Operating Characteristic“). Typischerweise besteht eine solche Tabelle aus einer Spalte mit den Ausprägungen eines binären Merkmals („ja/nein“, „pos/neg“ etc.) und einer oder mehrerer Spalten mit zugehörigen Messwerten einer meist kontinuierlichen Messgröße. Eine ROC-Kurve entsteht dadurch, dass für alle möglichen Cutoff-Werte entlang dieser kontinuierlichen Messgröße Sensitivität und 1-Spezifizität abgetragen werden.

## Dialogbox

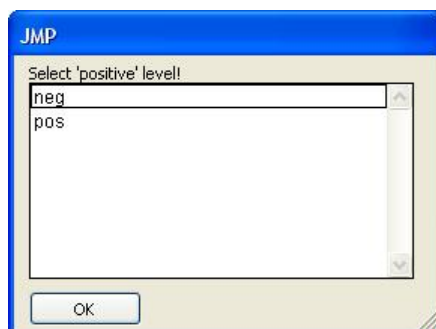
Ist eine solche Datentabelle geöffnet und startet man das Skript, so öffnet sich eine Dialogbox (vgl. Abbildung 1)



**Abbildung 1: Das Dialog-Fenster**

Hier können Sie die zugehörigen Spalten auswählen. Die Spalte „Evaluation“ enthält das binäre Merkmal, das sie vorhersagen möchten, also z.B. „0/1“, oder, wie für diagnostische Verfahren typisch, „positiv/negativ“. In das Fenster „ROC Columns“ können Sie eine oder mehrere Spalten eintragen, von denen Sie die ROC-Kurve zeichnen wollen. Diese Spalten enthalten also kontinuierliche Messdaten, z.B. eines Blutwertes. Unten links finden Sie ein Dialogfeld mit der Überschrift „Repetitions (bootstrap)“. Bootstrapping ist ein statistisches Verfahren, dass hier zur Berechnung von Konfidenzintervallen eingesetzt wird. Die hier eingetragene Zahl ist die Anzahl der computersimuliert erstellten Bootstrap-Samples. Jedes Bootstrap-Sample besteht aus genauso vielen Datenpunkten wie die ursprünglichen Daten.

Wenn Sie auf OK klicken, öffnet sich ein Auswahlfenster. Sie sehen eine Liste aller in der Spalte „Evaluation“ vorkommender Merkmalsausprägungen (vgl. Abbildung 2). Bitte wählen Sie diejenige Ausprägung aus, die dem positiven Level entspricht.



**Abbildung 2: Auswahl des positiven Levels**

## Das Report-Fenster

Je nach Datenumfang und Anzahl Bootstrap-Samples können die Berechnungen einige Zeit in Anspruch nehmen. Sind die Berechnungen beendet, öffnet sich ein Report-Fenster, das aus drei nebeneinander angeordneten Bereichen besteht. Jeder Bereich beginnt mit einer Graphik, darunter befinden sich weitere Gliederungspunkte mit statistischen Kennzahlen. Wir geben im folgenden eine Beschreibung der drei Bereiche, von links beginnend. Dabei verwenden wir den Datensatz „test\_data\_normal.jmp“, in dem zwei normalverteilte Verteilungen mit jeweils 1000 Datenpunkten und verschiedenen Mittelwerten überlagert sind.

### Linker Bereich: allgemeine Informationen

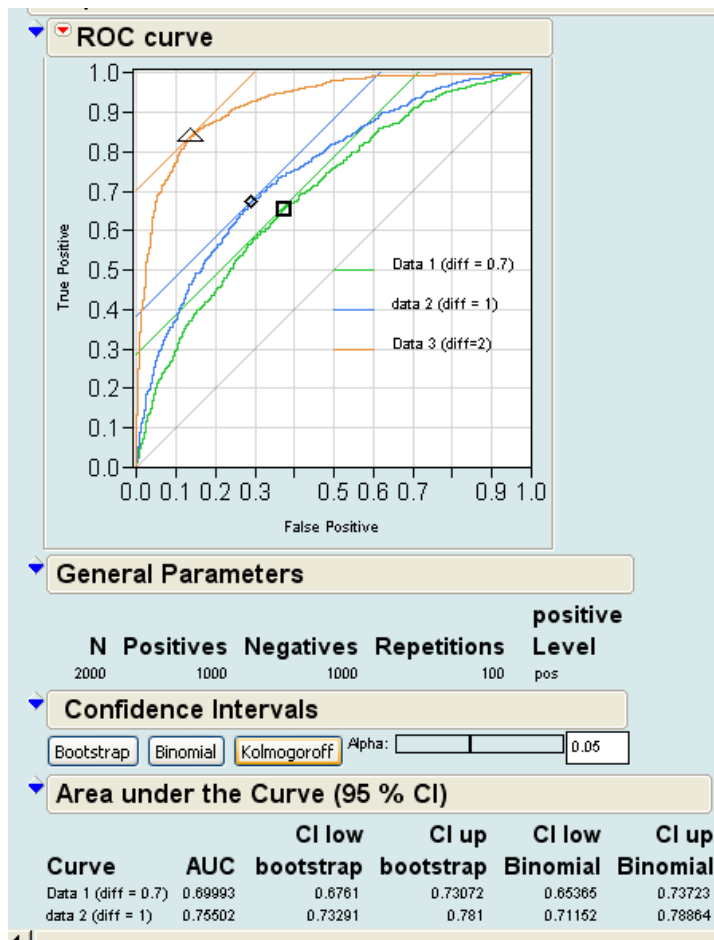


Abbildung 3: linker Bereich des Report-Fensters

Der linke Bereich beginnt mit einer klassischen Darstellung der ROC-Kurven (vgl. Abbildung 3). Die richtig positiven Werte sind gegen die falsch positiven aufgetragen. In der Graphik hat jede Kurve ihre Farbe, eine kleine Legende ermöglicht die leichte Identifizierung. Die Symbole mit den Tangenten stellen die Cutoff-Punkte dar, zu ihnen kommen wir im zweiten Teil. Unterhalb der Graphik befindet sich ein erster Gliederungspunkt mit allgemeinen Informationen (vgl. Abbildung 4). N bezeichnet die Anzahl der eingelesenen Datenpunkte, gefolgt von der Anzahl Werte mit positiver bzw. negativer Merkmalsausprägung. Anschließend folgen die Repetitions, die im ersten Dialog für das Bootstrapping festgelegt wurden. Schließlich wird der positive Level, der im zweiten Dialogfenster ausgewählt wurde, ausgegeben.

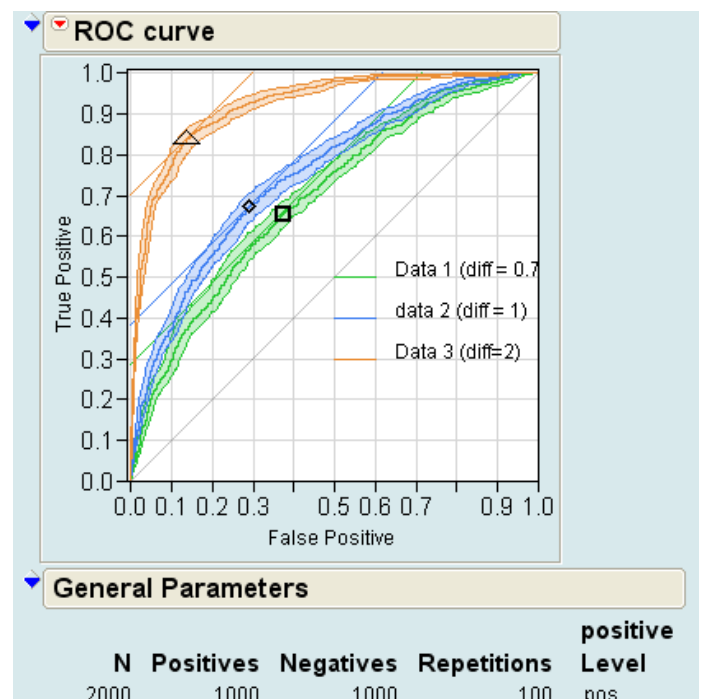
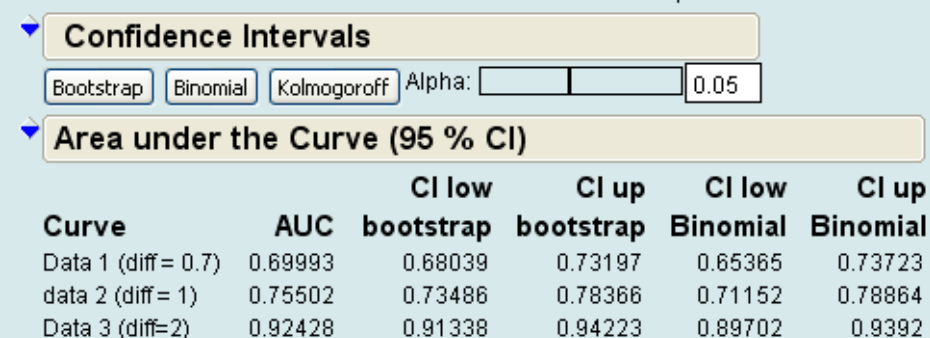


Abbildung 4: allgemeine Parameter und Bootstrap-Konfidenzbänder

Der zweite Gliederungspunkt beschreibt die Konfidenzbänder (vgl. Abbildung 5). Für die Berechnung der Konfidenzbänder werden 3 verschiedenen Varianten angeboten. Sie werden von links nach rechts immer konservativer, d.h., dass die Kolmogoroff-Bänder am breitesten sind. Klickt man auf die entsprechende Schaltfläche, werden die zugehörigen Konfidenzbänder eingeblendet. Erneutes Klicken blendet sie wieder aus. Neben den Kolmogoroff-Bändern stehen noch Konfidenzbänder zur Verfügung, die auf einem Binomialmodell beruhen, sowie Konfidenzbänder, die durch ein Bootstrapping-Verfahren berechnet wurden. Die Konfidenzbänder des Bootstrap-Verfahrens sind farblich besonders hervorgehoben



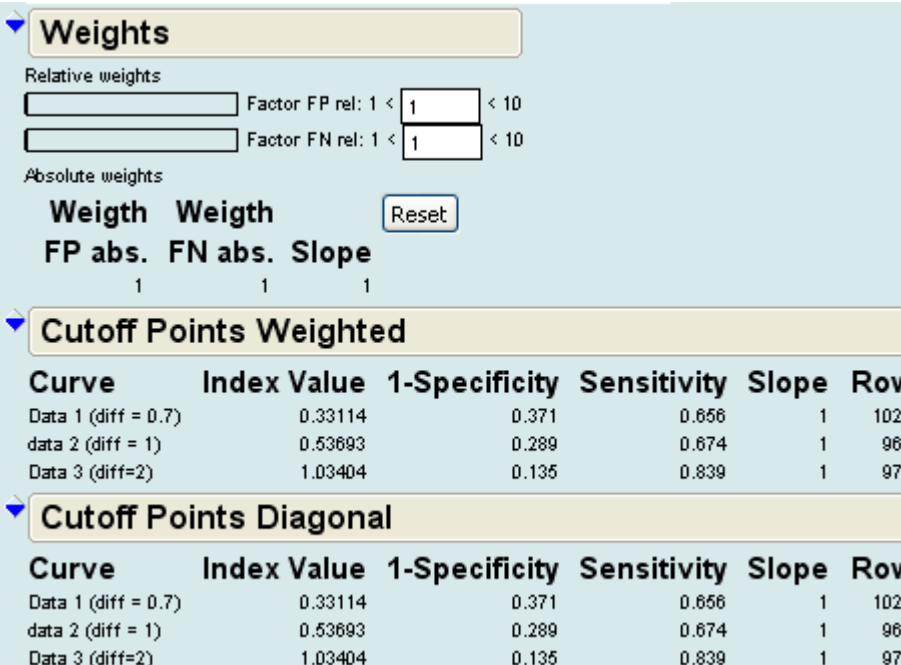
Curve	AUC	CI low		CI up	
		bootstrap	bootstrap	Binomial	Binomial
Data 1 (diff= 0.7)	0.69993	0.68039	0.73197	0.65365	0.73723
data 2 (diff= 1)	0.75502	0.73486	0.78366	0.71152	0.78864
Data 3 (diff=2)	0.92428	0.91338	0.94223	0.89702	0.9392

Abbildung 5: Gliederungspunkte Konfidenzbänder und AUC

Rechts von den Schaltflächen befinden sich ein Schieberegler und ein Eingabefeld. Beide steuern das Signifikanzniveau  $\alpha$ . Wird  $\alpha$  durch den Schieberegler oder durch direkte Eingabe verändert (mögliche Werte sind 0.01 bis 0.1 in 10 Stufen), so werden unmittelbar die zugehörigen Konfidenzbänder neu berechnet und angezeigt. Durch Hin- und Herschieben des Schiebereglers kann man so beobachten, wie die Konfidenzbänder umso breiter werden, je höher man das Signifikanzniveau ansetzt.

Der letzte Gliederungspunkt (s. Abbildung 5) auf der linken Seite zeigt die so genannte „Area under the Curve“ (AUC), also die Fläche unter der Kurve. Diese nimmt Werte zwischen 0.5 und 1 an und ist umso größer, je trennschärfer das untersuchte Verfahren ist. Zu den AUC kann man auf verschiedene Weisen Konfidenzintervalle berechnen. Die 95%-Konfidenzintervalle, die sich aus dem Bootstrap-Verfahren und aus dem Binomialmodell ergeben, sind im Bericht ausgegeben.

## Mittlerer Bereich: Cutoff-Punkte



Curve	Index Value	1-Specificity	Sensitivity	Slope	Row
Data 1 (diff = 0.7)	0.33114	0.371	0.656	1	1028
data 2 (diff = 1)	0.53693	0.289	0.674	1	964
Data 3 (diff=2)	1.03404	0.135	0.839	1	975

Der mittlere Bereich beginnt mit einer vergrößerten Darstellung des Bereichs um den Cutoff-Punkt. Es ist genau die gleiche Graphik wie auf der linken Seite, lediglich mit einer anderen Skalierung. Darunter befinden sich verschiedene Gliederungspunkte, die sich mit den Cutoffs beschäftigen.

Der letzte Teil, „Cutoff Points Diagonal“, berechnet die klassischen Cutoff-Punkte. Diese werden dadurch ermittelt, dass falsch positive und falsch negative Ergebnisse relativ gleich gewichtet werden. Der optimale Trennpunkt wird dann durch den Berührungspunkt der Tangente an die ROC beschrieben, die eine Steigung von 45 Grad besitzt. Diese Punkte sind für jede einzelne Kurve berechnet. Der zugehörige Messwert („Index Value“), der Wert auf der x- und y-Achse sowie die Steigung (hier zwangsläufig 1) sind ausgegeben. Die letzte Spalte enthält die Zeilennummer des zugehörigen Wertes in der Ausgabetable „Classification Results“.

Abbildung 6: Gliederungspunkte zu den Cutoff-Werten

Der zweite Bericht mit Cutoff-Punkten über den diagonalen Cutoffs enthält zu Beginn die gleichen Informationen. Hier ist es aber nun möglich, mit Hilfe der Schieberegler oder durch direkte Eingabe die Gewichte der falsch positiven bzw. falsch negativen Ergebnisse gegeneinander zu verschieben. Die zugehörigen optimalen Cutoff-Punkte werden automatisch neu berechnet, ausgegeben und graphisch dargestellt. Der „Reset“-Button setzt die Cutoff-Werte wieder auf das relative Gewichtsverhältnis von 1:1 zurück, so dass die Werte wieder mit den diagonalen Cutoff-Punkten übereinstimmen.

### Rechter Bereich: partial Area under the Curve

Im rechten Teil der Ausgabe befindet sich erneut eine ROC-Graphik. Hier interessiert man sich besonders für den Teil der ROC, der zwischen zwei festgelegten Anteilen falsch positiver Werte liegen. Diese zwei Randpunkte können entweder in der Graphik durch Verschieben der zugehörigen Geraden oder durch direkte Eingabe der entsprechenden Raten unterhalb der Graphik festgelegt werden. Das Skript berechnet automatisch die zugehörige Fläche zwischen diesen beiden Randwerten und gibt diese zusammen mit einem Konfidenzintervall aus (pAUC abs, CI low, CI up). Der vierte Wert, pAUC rel, stellt eine Transformation nach McClish dar, die dafür sorgt, dass der pAUC stets zwischen 0.5 und 1 liegt. Dies ermöglicht die gleiche Interpretation wie bei der gewöhnlichen AUC.

Die Fläche zwischen den ersten beiden ROC-Kurven ist über die gewählte Breite eingefärbt. Diese Fläche ist grau, falls der Unterschied zwischen den beiden pAUC-Werten statistisch auf einem 95% Niveau nicht signifikant ist. Im Falle der Signifikanz, wie im Beispiel Abbildung 7, wird die Fläche rötlich dargestellt.

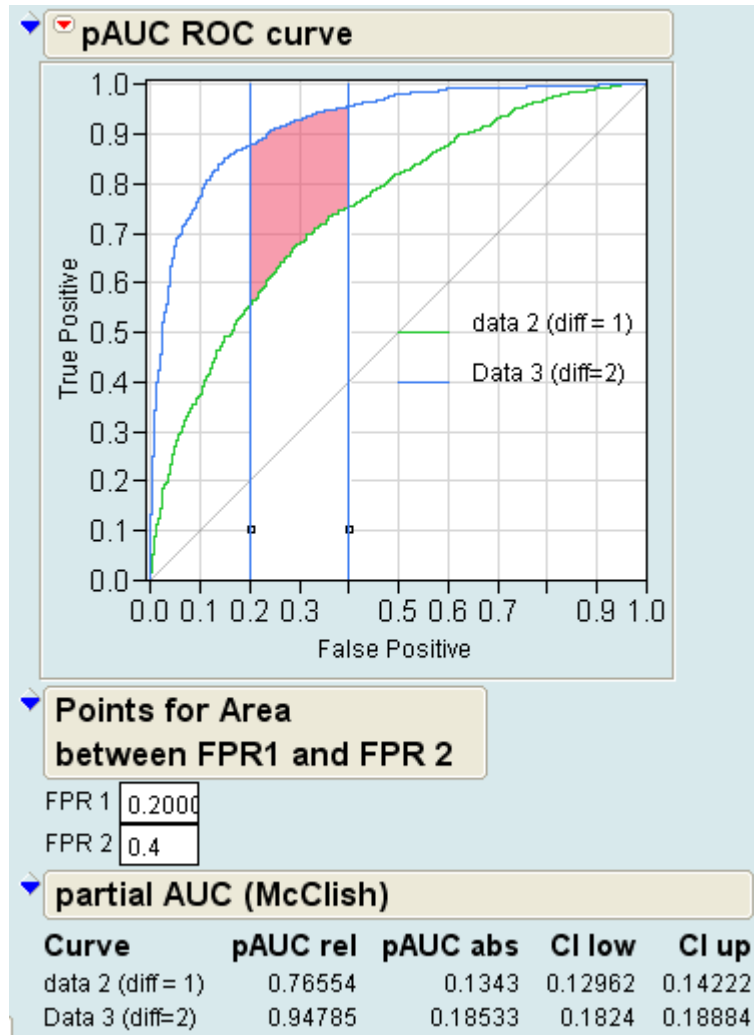
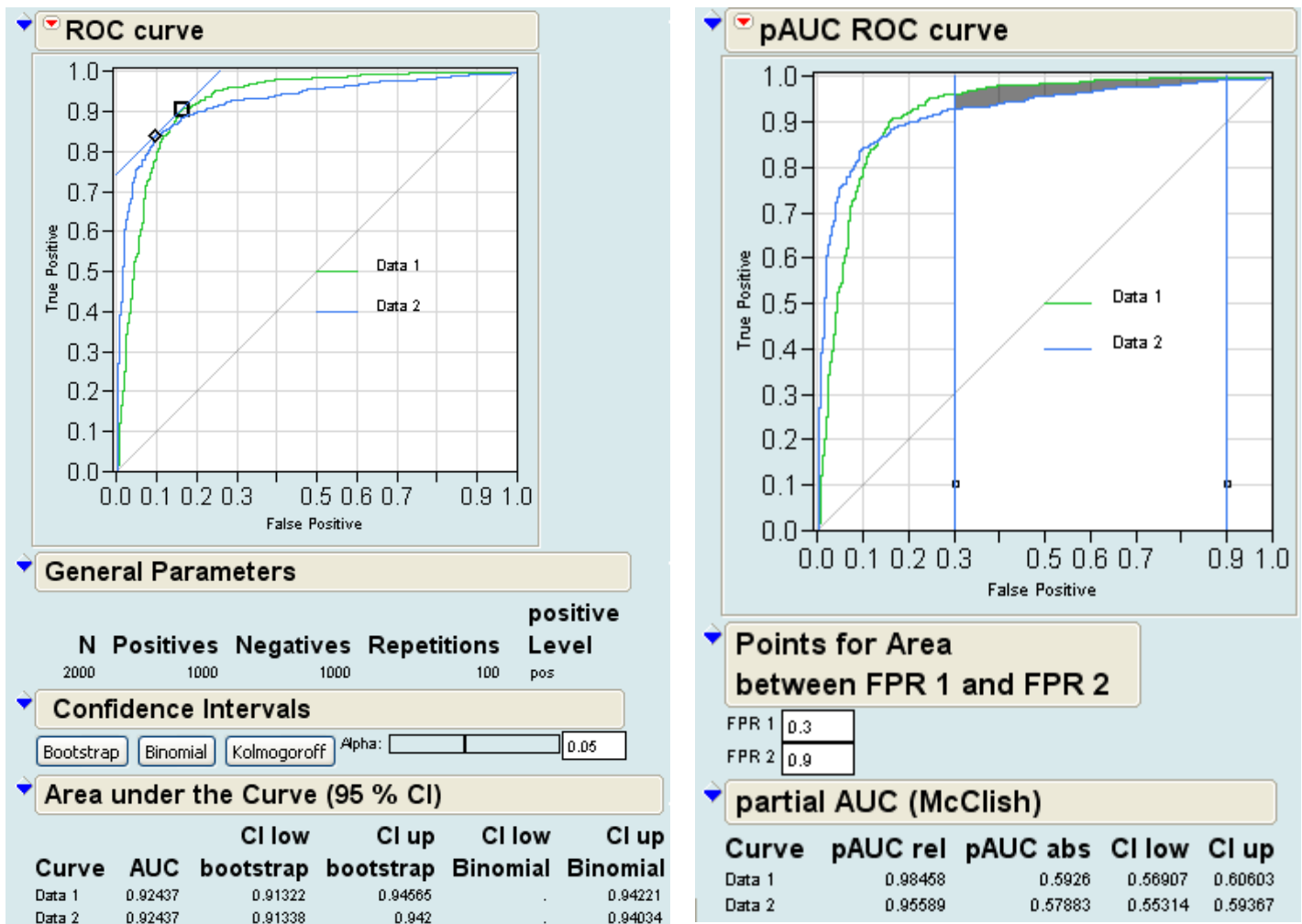


Abbildung 7: Bericht zu partial Area under the Curve

Das Konzept der partial Area under the Curve ist besonders interessant, wenn ROC-Kurven sich schneiden (Datensatz „test\_data\_crossing.jmp“). Es kann vorkommen, dass sie gleiche AUC-Werte besitzen (vgl. ).



**Abbildung 8: Vergleich AUC und pAUC für kreuzende ROC-Kurven**

Dieses Kriterium kann also für eine Entscheidung nicht herangezogen werden. Interessiert man sich aber speziell für einen Bereich bestimmter Spezifitäten, z.B. zwischen 0.1 und 0.7, (entsprechend falsch positiver Raten von 0.3 bis 0.9), so lässt sich mit Hilfe der pAUC das bessere Verfahren bestimmen (s. Abbildung 8).