

Машинное обучение, ФКН ВШЭ

Семинар №5

1 AUC-ROC

На лекции мы познакомились с такой важной метрикой качества бинарной классификации, как площадь под ROC-кривой (AUC-ROC). Напомним её определение. Рассмотрим задачу бинарной классификации с метками классов $\mathbb{Y} = \{-1, +1\}$, и пусть задан некоторый алгоритм $b(x)$, позволяющий вычислять оценку принадлежности объекта x положительному классу. AUC-ROC позволяет оценивать качество классификации для семейства алгоритмов следующего вида:

$$a(x; t) = \begin{cases} -1, & b(x) \leq t, \\ +1, & b(x) > t, \end{cases}$$

т.е. алгоритмов, присваивающих метки объектам в соответствии с оценками $b(x)$, отсекая их по некоторому порогу t . Каждый алгоритм (получающийся при фиксации значения порога t) представляется точкой на плоскости (FPR, TPR), где

$$\text{FPR} = \frac{\text{FP}}{\text{FP} + \text{TN}} = \frac{\text{FP}}{\ell_-},$$

$$\text{TPR} = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} = \frac{\text{TP}}{\ell_+},$$

ℓ_-, ℓ_+ — количество объектов отрицательного и положительного классов соответственно. AUC-ROC, в свою очередь, является площадью под получившейся кривой.

Изучим подробнее некоторые важные свойства данной метрики.

Критерий AUC-ROC имеет большое число интерпретаций — например, он равен вероятности того, что случайно выбранный положительный объект окажется позже случайно выбранного отрицательного объекта в ранжированном списке, порожденном $b(x)$. Разберем подробнее немного другую формулировку.

Задача 1.1. В ранжировании часто используется функционал «доля дефектных пар». Его можно определить и для задачи бинарной классификации.

Пусть дан классификатор $b(x)$, который возвращает оценки принадлежности объектов классу $+1$, и пусть все значения $b(x_i)$, $i = \overline{1, \ell}$, для некоторой выборки $X = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^{\ell}$ различны. Отсортируем все объекты по возрастанию ответа классификатора: $b(x_{(1)}) < \dots < b(x_{(\ell)})$. Обозначим истинные ответы на этих объектах

через $y_{(1)}, \dots, y_{(\ell)}$. Тогда доля дефектных пар записывается как

$$DP(b, X) = \frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}].$$

Как данный функционал связан с AUC-ROC?

Решение. Для начала разберем процедуру построения ROC-кривой. Сперва все объекты сортируются по неубыванию оценки $b(x)$, тем самым формируя список $x_{(1)}, \dots, x_{(\ell)}$. Заметим, что для построения ROC-кривой достаточно рассмотреть $(\ell + 1)$ различных значений порога t , соответствующих всем различным способам классификации выборки, порожденным алгоритмом $b(x)$, — например, в качестве таких порогов можно рассмотреть следующий набор:

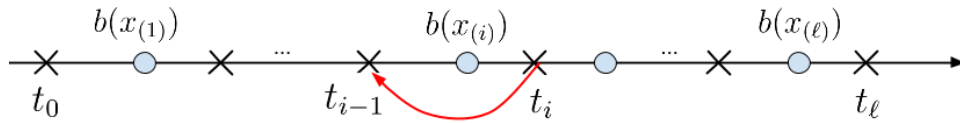
$$\begin{aligned} t_{\ell} &= b(x_{(\ell)}) + 1, \\ t_i &= \frac{b(x_{(i)}) + b(x_{(i+1)})}{2}, \quad i = \overline{1, \ell-1}, \\ t_0 &= b(x_{(1)}) - 1. \end{aligned}$$

Зафиксируем значение порога $t = t_{\ell} = b(x_{(\ell)}) + 1$, в этом случае имеем

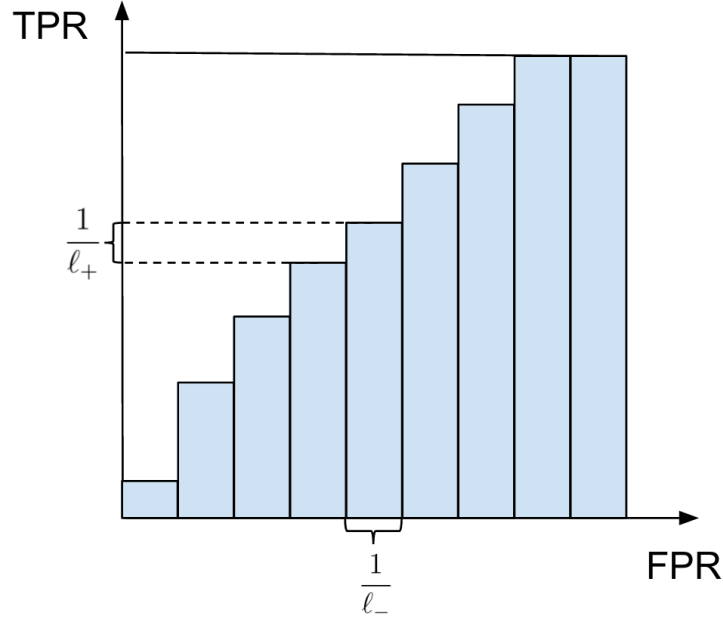
$$\text{FPR} = \frac{\text{FP}}{\ell_-} = \frac{0}{\ell_-} = 0,$$

$$\text{TPR} = \frac{\text{TP}}{\ell_+} = \frac{0}{\ell_+} = 0.$$

Таким образом, алгоритму $a(x; t_{\ell})$ соответствует точка $(0; 0)$ на плоскости, откуда начинается построение ROC-кривой. Будем перебирать пороги в порядке невозрастания их значения, начиная с t_{ℓ} . Пусть мы хотим уменьшить значение порога с t_i до t_{i-1} . При этом классификация объекта $x_{(i)}$ (и только его) изменится с отрицательной на положительную. Рассмотрим 2 случая.



1. $y_{(i)} = +1$. В этом случае классификатор начнет верно классифицировать объект, на котором ранее допускал ошибку, при этом FPR не изменится, а TPR повысится на $\frac{1}{\ell_+}$.
2. $y_{(i)} = -1$. В этом случае классификатор начнет ошибаться на объекте, который ранее классифицировал верно, при этом TPR не изменится, а FPR повысится на $\frac{1}{\ell_-}$.



Теперь рассмотрим, как при этом изменяется AUC-ROC. Заметим, что область под ROC-кривой состоит из непересекающихся прямоугольников, каждый из которых снизу ограничен осью FPR, а сверху — одним из горизонтальных отрезков, соответствующих второму из рассмотренных случаев. Поэтому каждый раз, когда имеет место второй случай, к текущей накопленной площади под кривой (которая изначально в точке $(0; 0)$ равна 0) добавляется площадь прямоугольника, горизонтальные стороны которого равны $\frac{1}{\ell_-}$, а вертикальные равны $\frac{1}{\ell_+} \sum_{j=i+1}^{\ell} [y_{(j)} = +1]$ (доля уже рассмотренных положительных объектов среди всех положительных), поэтому в этом случае текущее значение AUC-ROC увеличивается на $\frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{j=i+1}^{\ell} [y_{(j)} = +1]$. Итого, финальное значение AUC-ROC можно посчитать следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \text{AUC} &= \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i=1}^{\ell} [y_{(i)} = -1] \sum_{j=i+1}^{\ell} [y_{(j)} = +1] = \\
 &= \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i=1}^{\ell} \sum_{j=i+1}^{\ell} [y_{(i)} < y_{(j)}] = \\
 &= \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} (1 - [y_{(i)} = y_{(j)}] - [y_{(i)} > y_{(j)}]) = \\
 &= \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} (1 - [y_{(i)} = y_{(j)}]) - \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}] = \\
 &= \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} ([y_{(i)} \neq y_{(j)}]) - \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}] = \\
 &= \frac{\ell_+ \ell_-}{\ell_+ \ell_-} - \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}] = 1 - \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} > y_{(j)}].
 \end{aligned}$$

Отсюда получаем, что AUC-ROC и доля дефектных пар связаны следующим соотношением:

$$DP(b, X) = \frac{2\ell - \ell_+}{\ell(\ell - 1)}(1 - \text{AUC}(b, X)).$$

■

Заметим, что в случае, когда несколько объектов выборки имеют равные значения $b(x)$, при уменьшении значения порога с $t_i > b(x)$ до $t_{i-1} < b(x)$, где x — один из таких объектов, изменение значений FPR и TPR происходит одновременно, поэтому соответствующий участок ROC-кривой будет наклонным, а не горизонтальным или вертикальным.

Задача 1.2. Пусть даны выборка X , состоящая из 5 объектов, и классификатор $b(x)$, предсказывающий оценку принадлежности объекта положительному классу. Предсказания $b(x)$ и реальные метки объектов приведены ниже:

$$\begin{aligned} b(x_1) &= 0.2, & y_1 &= -1, \\ b(x_2) &= 0.4, & y_2 &= +1, \\ b(x_3) &= 0.1, & y_3 &= -1, \\ b(x_4) &= 0.7, & y_4 &= +1, \\ b(x_5) &= 0.05, & y_5 &= +1. \end{aligned}$$

Вычислите AUC-ROC для множества классификаторов $a(x; t)$, порожденного $b(x)$, на выборке X .

Решение. В соответствии с процессом построения ROC-кривой, описанным в предыдущей задаче, отсортируем оценки $b(x_i)$ в порядке их неубывания: $(b(x_{(i)}))_{i=1}^{\ell} = (0.05, 0.1, 0.2, 0.4, 0.7)$. Также составим последовательность реальных меток объектов из этого упорядоченного списка: $(y_{(i)})_{i=1}^{\ell} = (+1, -1, -1, +1, +1)$.

Построим ROC-кривую (см. рис. 1), откуда $\text{AUC-ROC} = \frac{2}{3}$.

■

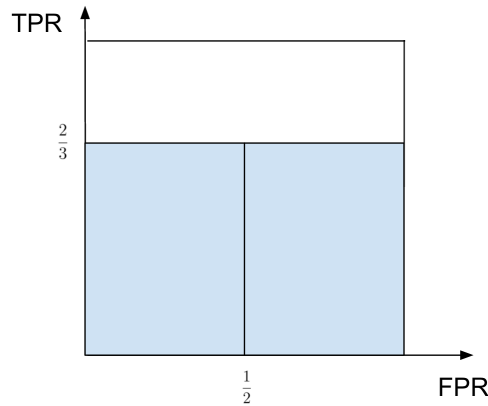


Рис. 1. Иллюстрация к задаче 1.2.

Заметим, что при вычислении AUC-ROC на некоторой выборке X для итогового классификатора $a(x; t)$ важны не конкретные значения $b(x_i)$, $i = \overline{1, \ell}$, а порядок расположения объектов в отсортированном по неубыванию списке $b(x_{(1)}), \dots, b(x_{(\ell)})$, порожденным алгоритмом $b(x)$. Таким образом, для фиксированной выборки X алгоритм $b(x)$ задаёт перестановку на её объектах, которая в дальнейшем используется при расчёте AUC-ROC.

Задача 1.3. Пусть $b(x)$ — классификатор, предсказывающий оценку принадлежности объекта x классу $+1$ таким образом, что для некоторой выборки X он равновероятно выдаёт на её объектах одну из всех возможных перестановок. Чему равно матожидание AUC-ROC этого классификатора?

Решение. Как было показано в задаче 1.1, для AUC-ROC верно

$$\text{AUC} = \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} [y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1],$$

поэтому

$$\mathbb{E}\text{AUC} = \frac{1}{\ell_+ \ell_-} \sum_{i < j}^{\ell} \mathbb{E}([y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]).$$

Заметим, что величина $[y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]$ принимает значения 0 и 1, поэтому

$$\mathbb{E}([y_{(i)} = -1][y_{(j)} = +1]) = \mathbb{P}(y_{(i)} = -1, y_{(j)} = +1) = \frac{\ell_- \ell_+ (\ell - 2)!}{\ell!} = \frac{\ell_- \ell_+}{\ell(\ell - 1)}.$$

Отсюда имеем

$$\mathbb{E}\text{AUC} = \frac{1}{\ell_- \ell_+} \sum_{i < j}^{\ell} \frac{\ell_- \ell_+}{\ell(\ell - 1)} = \frac{\ell(\ell - 1)}{2} \frac{1}{\ell(\ell - 1)} = \frac{1}{2}.$$

■

Итого, можем заметить, что значение AUC-ROC, близкое к $\frac{1}{2}$, означает, что классификатор близок к случайному, тогда как значение, равное 1, означает, что классификатор безошибочно классифицирует объекты при некотором значении порога.

Задача 1.4. Пусть $b(x)$ — некоторый классификатор, предсказывающий оценку принадлежности объекта x положительному классу, и при этом AUC-ROC множества классификаторов $a(x; t)$, порожденных $b(x)$, на некоторой выборке X принимает значение, меньшее 0.5. Как можно скорректировать прогнозы классификаторов $a(x; t)$, чтобы они были более осмысленными по сравнению с прогнозами классификатора, выдающего случайные ответы?

Решение.

Для некоторого классификатора $a(x; t)$ рассмотрим классификатор $a^*(x; t)$, выдающий противоположные метки по сравнению с $a(x; t)$, т.е.:

$$a^*(x; t) = -a(x; t).$$

При этом ТР и ФР на обучающей выборке для некоторого классификатора $a^*(x; t)$ будут принимать следующие значения:

$$\begin{aligned} \text{TP}(a^*(x; t), X) &= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a^*(x; t) = +1] = \\ &= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = +1][a(x; t) = -1] = \text{FN}(a(x; t), X), \\ \text{FP}(a^*(x; t), X) &= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a^*(x; t) = +1] = \\ &= \sum_{i=1}^{\ell} [y_i = -1][a(x; t) = -1] = \text{TN}(a(x; t), X). \end{aligned}$$

Отсюда имеем

$$\begin{aligned} \text{TPR}(a^*(x; t), X) &= \frac{\text{TP}(a^*(x; t), X)}{\ell_+} = \frac{\text{FN}(a(x; t), X)}{\ell_+} = \\ &= \frac{\ell_+ - \text{TP}(a(x; t), X)}{\ell_+} = 1 - \text{TPR}(a(x; t), X), \\ \text{FPR}(a^*(x; t), X) &= \frac{\text{FP}(a^*(x; t), X)}{\ell_-} = \frac{\text{TN}(a(x; t), X)}{\ell_-} = \\ &= \frac{\ell_- - \text{FP}(a(x; t), X)}{\ell_-} = 1 - \text{FPR}(a(x; t), X), \end{aligned}$$

поэтому классификатор $a^*(x; t)$ будет представлен на плоскости точкой, симметричной точке, отвечающей классификатору $a(x; t)$, относительно точки $(0.5; 0.5)$.

Рассмотрим ROC-кривую для множества классификаторов $a(x; t)$. Пусть площадь областей единичного квадрата, находящихся между его диагональю и частями ROC-кривой, расположенных под ней, равна S_- , а между диагональю и частями ROC-кривой, расположенных над диагональю, — S_+ . Тогда AUC-ROC для такой кривой принимает значение $0.5 + S_+ - S_- < 0.5$ (по условию), отсюда $S_+ - S_- < 0$.

Как было показано ранее, ROC-кривая для множества классификаторов $a^*(x; t)$ симметрична ROC-кривой для множества классификаторов $a(x; t)$, а потому для первой кривой область, соответствующая площади S_- , будет расположена над диагональю единичного квадрата, площади S_+ — под диагональю. Отсюда AUC-ROC для множества классификаторов $a^*(x; t)$ будет принимать значение $0.5 - S_+ + S_- > 0.5$, а потому прогнозы классификаторов из этого множества более осмысленны по сравнению со случайным классификатором. ■

§1.1 Прямая оптимизация AUC-ROC

При обучении модели в бинарной классификации чаще всего решается задача минимизации верхней оценки функционала ошибки:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i] \leq \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} \tilde{L}(M_i) \rightarrow \min_w$$

Однако иногда возникает необходимость оптимизировать более сложные метрики — в частности, AUC-ROC. Напрямую оптимизировать подобные метрики не представляется возможным из-за их дискретной структуры, однако мы можем использовать трюк с верхней оценкой функционала ошибки и в этом случае. В задаче 1.1 мы показали, что AUC-ROC связан с долей дефектных пар в выборке, поэтому максимизация AUC-ROC равносильна минимизации доли дефектных пар.

$$DP(b, X) = \frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i < j}^{\ell} [y_i < y_j][b(x_i) > b(x_j)] =$$

$$\frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i < j}^{\ell} [y_i < y_j][b(x_j) - b(x_i) < 0] \leq \frac{2}{\ell(\ell-1)} \sum_{i < j}^{\ell} [y_i < y_j] \tilde{L}(b(x_j) - b(x_i)) \rightarrow \min_b$$

Если верхняя оценка \tilde{L} дифференцируема по параметрам модели, то можно оптимизировать такой функционал при помощи градиентных методов.