Оценка моделей

Виктор Владимирович Китов

МГУ им.Ломоносова, ф-т ВМиК, кафедра ММП.

I семестр 2015 г.

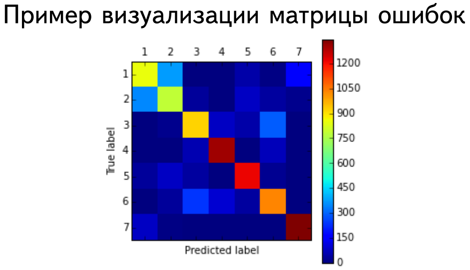
Матрица ошибок (confusion matrix)

Матрица ошибок $M = \{m_{ij}\}_{i,j=1}^{C}$ показывает количества объектов, реально принадлежащих классу ω_i, но отнесенных к ω_j.

$$
\begin{array}{ccc}
 & & \text{Прогнозный класс} \\
 & & \begin{array}{cccc} 1 & 2 & \cdots & C \end{array} \\
\text{Истинный класс} & \begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ C \end{array} & \begin{bmatrix} n_{11} & n_{12} & & \\ n_{21} & n_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & n_{CC} \end{bmatrix}
\end{array}
$$

Диагональные элементы соответствуют правильным классификациям, а внедиагональные - неправильным.

Пример визуализации матрицы ошибок



- Видно, что ошибки сконцентрированы на разделении классов 1 и 2.
- Классы 1, 2 можно объединить в один класс «1+2», решить 6-то классовую задачу, а потом для всех объектов, отнесенных к «1+2», разделять их на классы 1 и 2 отдельным классификатором.

Случай 2х классов

Матрица ошибок:

		Прогноз	
		+	-
Правильный класс	+	TP (true positives)	FN (false negatives)
	-	FP (false positives)	TN (true negatives)

P и N - число наблюдений положительного и отрицательного класса.

$$P = TP + FN, \quad N = TN + FP$$

Меры качества

Точность (accuracy):	$\frac{TP+TN}{P+N}$
Доля ошибок (error rate):	1-accuracy=$\frac{FP+FN}{P+N}$
FPR (ложная тревога):	$\frac{FP}{N}$
TPR (вероятность обнаружения):	$\frac{TP}{P}$
Точность (precision):	$\frac{TP}{TP+FP}$
Полнота (recall):	$\frac{TP}{P}$
F-мера:	$\frac{2}{\frac{1}{Precision}+\frac{1}{Recall}}$
взвешенная F-мера:	$\frac{1}{\frac{\beta^2}{1+\beta^2}\frac{1}{Precision}+\frac{1}{1+\beta^2}\frac{1}{Recall}}$

Разделимость и надежность

- **Разделимость (discriminability)** измеряет правильность соотнесения классов
  - например, все ранее перечиленные меры: доля ошибок, точность, полнота, и т.д.
- **Надежность (reliability)** измеряет правильность соотнесения вероятностей классов
  - Правдоподобие (что объект x_i принадлежит классу y_i, $i = 1, 2, ...N$):

$$\prod_{i=1}^{N} \widehat{p}(y_i | x_i)$$

  - Brier score:

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{c=1}^{C} \left(\mathbb{I}[x_i \in \omega_c] - \widehat{p}(\omega_c | x_i)\right)^2$$

- Пример хорошей разделимости, но плохой надежности.

Table of Contents

Байесовское решающее правило

- Обозначение: $\widehat{\omega}_i$ означает, что «прогноз равен классу ω_i»
- Матрица цены:

Правильный класс / Прогноз

	$\widehat{\omega}_1$	$\widehat{\omega}_2$
ω_1	0	λ_1
ω_2	λ_2	0

- λ_1, λ_2-цена неправильной классификации класса ω_1 и ω_2 соответственно.

Байесовское решающее правило

- Цена прогноза $\widehat{\omega}_1$:
  $L(\widehat{\omega}_1) = \lambda_2 p(\omega_2|x) = \lambda_2 p(\omega_2) p(x|\omega_2)/p(x)$
- Цена прогноза $\widehat{\omega}_2$:
  $L(\widehat{\omega}_2) = \lambda_1 p(\omega_1|x) = \lambda_1 p(\omega_1) p(x|\omega_1)/p(x)$
- *Байесовское правило* минимизирует ожидаемую цену:

$$\widehat{\omega}^* = \arg\min_{\widehat{\omega}} L(\widehat{\omega})$$

- Оно эквивалентно:
  $\widehat{\omega}* = \widehat{\omega}_1 \Leftrightarrow \lambda_2 p(\omega_2) p(x|\omega_2) < \lambda_1 p(\omega_1) p(x|\omega_1) \Leftrightarrow$

$$\frac{p(x|\omega_1)}{p(x|\omega_2)} > \frac{\lambda_2 p(\omega_2)}{\lambda_1 p(\omega_1)} = \mu$$

Дискриминативные решающие правила

- Правило, основанное на дискриминантных ф-циях:
  - соотнести x классу $\omega_1 \iff g_1(x) - g_2(x) > \mu$
  - соотнести x классу $\omega_1 \iff g_1(x)/g_2(x) > \mu$ (для $g_1(x) > 0$, $g_2(x) > 0$)
- Правило, основанное на вероятностях:
  - соотнести x классу $\omega_1 \iff P(\omega_1|x) > \mu$

ROC кривая

- ROC кривая - зависимость вероятности обнаружения положительного класса (TPR) от вероятности ложной тревоги (FPR) для различных μ.
- Если μ уменьшается, алгоритм чаще выбирает ω_1 и
    - TPR=$1-\varepsilon_1$ возрастает
    - FPR=ε_2 также возрастает
- Диагональ соответствует случайной классификации ω_1 и ω_2 с вероятностями μ и $1-\mu$.
- Характеризует качество классификации для различных значений μ.
    - более выпуклые наверх кривые лучше

Изо-линии цены

- Обозначим $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ - вероятности ошибиться на классе ω_1 и ω_2 соответственно.
- $1 - \varepsilon_1 = TPR$, $\varepsilon_2 = FPR$
- Ожидаемые потери

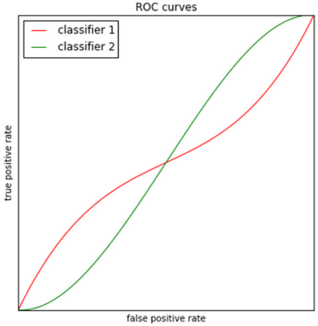
$$L = \lambda_2 p(\omega_2)\varepsilon_2 + \lambda_1 p(\omega_1)\varepsilon_1 = \lambda_2 p(\omega_2)\varepsilon_2 - \lambda_1 p(\omega_1)(1-\varepsilon_1) + \lambda_1 p(\omega_1)$$

- Изо-линия потерь:

$$(1 - \varepsilon_1) = \frac{\lambda_2 p(\omega_2)}{\lambda_1 p(\omega_1)}\varepsilon_2 + \frac{\lambda_1 p(\omega_1) - L}{\lambda_1 p(\omega_1)}$$

- В оптимальной точке изо-линия касается ROC-кривой с тангенсом угла наклона $\frac{\lambda_2 p(\omega_2)}{\lambda_1 p(\omega_1)}$

Сравнение классификаторов по ROC кривой



Сравнение классификаторов по ROC кривой

Как сравнивать различные классификаторы?

Критерий AUC

- AUC - площадь под ROC-кривой:
  - глобальная характеристика качества
  - AUC$\in [0, 1]$
    - AUC=0.5 - эквивалент случайного угадывания
    - AUC=1 - безошибочное распознавание.
  - равна вероятности того, что для случайных $x_1 \in \omega_1$ и $x_2 \in \omega_2$ будет выполнено: $\widehat{p}(\omega_1|x_1) > \widehat{p}(\omega_2|x)$

Компромисс между точечным сравнением и AUC

- Компромисс между точным μ и произвольным μ:
  - $p(\mu)$ - плотность вероятности μ
  - определим $L(\mu) = \begin{cases} +1 & \text{если 1й классификатор лучше} \\ -1 & \text{если 2й классификатор лучше} \end{cases}$
  - выбираем 1-й классификатор $\Longleftrightarrow \int_0^1 L(\mu)p(\mu)d\mu > 0$.

LC index

- LC index - применение методики к байесовскому решающему правилу:
  - Отмасштабируем λ_1 и λ_2 так, что $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$
  - определим $\lambda_1 = \lambda$, $\lambda_2 = 1 - \lambda$
  - для каждого $\lambda \in [0, 1]$ рассчитаем
    $$L(\lambda) = \begin{cases} +1 & \text{если 1й классификатор лучше} \\ -1 & \text{если 2й классификатор лучше} \end{cases}$$
  - определим плотность вероятности λ: $p(\lambda)$ (например, треугольник)
  - выбираем 1-й классификатор $\iff \int_0^1 L(\lambda)p(\lambda)d\lambda > 0$.

Распределение вероятности ошибки

- Пусть e - вероятность ошибки на новом объекте.
- Цель - найти распределение вероятности e
  - знаем, что на отложенной выборке объема n было k ошибок.

Вероятность сделать k ошибок на выборке объема n:

$$p(k|e,n) = \binom{n}{k} e^k (1-e)^{n-k}$$

Тогда

$$p(e|k,n) = \frac{p(e,k|n)}{p(k|n)} = \frac{p(k|e,n)p(e|n)}{\int p(k|n)p(e|n)de}$$

Полагая априорное распределение $p(e|n) \equiv const$, получим

$$p(e|k,n) = \frac{p(k|e,n)}{\int p(k|n)de} \propto e^k (1-e)^{n-k}$$

Распределение вероятности ошибки

Поскольку бета-распределение имеет вид
$Be(x|\alpha,\beta) = [\Gamma(\alpha+\beta)/(\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta))]x^{\alpha-1}(1-x)^{\beta-1}$, то

$$p(e|k,n) \sim Be(k+1, n-k+1)$$

Бета-распределение:
$\xi \sim Be(\alpha,\beta) \Rightarrow \mathbb{E}[\xi] = \frac{\alpha}{\alpha+\beta},\ Var[\xi] = \frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta)^2(\alpha+\beta+1)}$