Задачи на совокупность значений показателей качества классификации

А. И. Майсурадзе

# Основные определения и обозначения

Рассмотрим матрицу ошибок (confusion matrix, часто употребляют более общий термин contingency table) для задачи классификации с двумя классами (binary classification task), где один из классов назван положительным (positive, P), а другой – отрицательным (negative, N). Матрица ошибок получается как результат применения классификатора к размеченной выборке. В её ячейках стоят целые неотрицательные числа – частоты ответов. Получается 4 рода ответов. При статистической проверке гипотез отрицательный класс соответствует нулевой гипотезе (нет тревоги), а положительный – альтернативе (бьём тревогу).

Таблица . Матрица ошибок для задачи классификации с двумя классами.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Predicted  class  Actual  class | Результат распознавания P (выбрана альтернатива) | Результат распознавания N (выбрана нулевая гипотеза) |
| Истинный класс P (верна альтернатива) | TP – количество истинноположительных ответов (лечим больного) | FN – количество ложноотрицательных ответов, ошибки II рода, пропуск цели (упустили больного) |
| Истинный класс N (верна нулевая гипотеза) | FP – количество ложноположительных ответов, ошибки I рода, ложная тревога (лечим здорового) | TN – количество истинноотрицательных ответов (отпустили здорового) |

Если не оговаривается иного, то предполагается, что матрица ошибок построена по конечной выборке, содержащей объекты обоих классов, т. е. и . Назовём это стандартным случаем.

Частоты (frequencies), стоящие в ячейках матрицы ошибок, являются исходными значениями для различных показателей качества классификации. Поскольку хочется, чтобы значения показателей качества были сопоставимы для выборок разного размера, принято от частот переходить к долям (rates, ratios).

Показатель качества классификации «общая точность» (accuracy, ACC) характеризует матрицу ошибок в целом и определяется формулой . Случай деления на ноль при положительном числителе невозможен. Неопределённость 0/0 возникает тогда и только тогда, когда выборка пустая, соответственно, эту неопределённость не раскрывают. При непустой выборке и в стандартном случае неопределённость 0/0 невозможна. Случаи или невозможны. Любое рациональное значение из [0,1] возможно даже в стандартном случае.

Случай означает классификатор, который правильно ответил на всех объектах выборки. Случай означает классификатор, который ошибается на всех объектах выборки. В случае бинарной классификации инверсия такого классификатора с даст классификатор с . Статистически худший бинарный классификатор – подкидывание монеты.

Показатель качества классификации «полнота» (recall, sensitivity, true positive rate, TPR) характеризует распознавание положительного класса и определяется формулой . Случай деления на ноль при положительном числителе невозможен. Неопределённость 0/0 возникает тогда и только тогда, когда выборка не содержит положительных объектов, соответственно, эту неопределённость не раскрывают. В стандартном случае неопределённость 0/0 невозможна. Случаи или невозможны. Любое рациональное значение из [0,1] возможно даже в стандартном случае.

Показатель качества классификации «точность» (precision, positive predictive value, PPV) характеризует распознавание положительного класса и определяется формулой . Случай деления на ноль при положительном числителе невозможен. Неопределённость 0/0 возникает тогда и только тогда, когда выборка пуста или классификатор отвергает (объявляет отрицательными) все объекты выборки. Неопределённость 0/0 возможна даже в стандартном случае. Если допустим классификатор, отвергающий все объекты, то неопределённость 0/0 возможна всегда. Случаи или невозможны. Любое рациональное значение из [0,1] возможно даже в стандартном случае.

Если матрица ошибок построена по конечной выборке, то значения всех этих показателей являются рациональными числами.

# Общий подход к задачам

Не любые сочетания значений , и возможны. Соответственно, возникают задачи на их допустимое сочетание.

Традиционно предполагается, что тестирование классификатора проходило на конечной выборке, возникла матрица ошибок, которая содержит целые неотрицательные числа. Основной подход к решению таких задач состоит в том, что проверяется существование подходящих неотрицательных целых частот TP, TN, FP, FN. Возникает система из 4 неравенств неотрицательности и некоторых равенств по исходным данным. Логически полное решение должно упомянуть все 4 неравенства. Дополнительного внимания заслуживают крайние ситуации с нулевыми частотами.

# Задача на возможные значения точности

Рассматривается задача классификации на два класса: положительный и отрицательный. В ходе тестирования классификатора получены следующие результаты. Полнота равна , общая точность равна . Какие значения может принимать точность ?

Поскольку задано определённое значение , то , выборка содержит положительные объекты.

Сразу отметим, что при , или , или , или исходные данные следует считать неверными. Ответ: .

Если , то и . Следовательно, .

Если и , то ответ: .

Если и , то ответ: . Даже в стандартном случае.

Если и , то ответ: . В стандартном случае только .

Если , то , , . Следовательно, .

Если и , то ответ: .

Случай и есть выше.

Ниже и .

Если , то , , . Следовательно, .

Если и , то ответ: .

Если и , то ответ: .

Ниже и . Тогда , . Выразим остальные частоты как доли положительного TP.

, надо обеспечить неотрицательность;

, всегда неотрицательно;

, надо обеспечить неотрицательность.

. Интересно отметить, что с ростом TN точность падает.

Неотрицательность FP соответствует условию . Случай есть выше. Сейчас множитель при положителен. Получили систему

Если , то , иначе .

Если , то ответ: , рациональное. Примечание: нужно большое TN, можно любое FP.

Если , то ответ: , рациональное. Примечание: можно любое TN, нужно большое FP.