

Analýza a klasifikace dat – přednáška 6



RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

Podzim 2017

Hodnocení úspěšnosti klasifikace a srovnání klasifikátorů

Hodnocení úspěšnosti klasifikace - úvod

Vstupní data

Subjekt	voxel 1	voxel 2	voxel 3	...	Skutečnost (správná třída)
1					pacient
2					pacient
3					pacient
4					kontrola
5					kontrola
6					kontrola

Výsledek
klasifikace

pacient
pacient
kontrola
kontrola
pacient
kontrola

Jak dobrá je klasifikační metoda, kterou jsme použili?

Hodnocení úspěšnosti klasifikace

Matice záměn (konfusní matice, confusion matrix):

		Skutečnost (správná třída)	
		Pacienti (+)	Kontroly (-)
Výsledek klasifikace	Pacienti (+)	TP	FP
	Kontroly (-)	FN	TN

TP („true positive“) – kolik výsledků bylo skutečně pozitivních (tzn. kolik pacientů bylo správně diagnostikováno jako pacienti).

FP („false positive“) – kolik výsledků bylo falešně pozitivních (tzn. kolik zdravých lidí bylo chybně diagnostikováno jako pacienti).

FN („false negative“) – kolik výsledků bylo falešně negativních (tzn. kolik pacientů bylo chybně diagnostikováno jako zdraví).

TN („true negative“) – kolik výsledků bylo skutečně negativních (tzn. kolik zdravých lidí bylo správně diagnostikováno jako zdraví).

Hodnocení úspěšnosti klasifikace

		Skutečnost (správná třída)	
		Pacienti (+)	Kontroly (-)
Výsledek klasifikace	Pacienti (+)	TP	FP
	Kontroly (-)	FN	TN

TP+FN

FP+TN

Senzitivita
(sensitivity)

Specifická
(specificity)

$TP / (TP+FN)$

$TN / (FP+TN)$

Celková správnost (accuracy): $(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)$

Chyba (error): $(FP+FN)/(TP+FP+FN+TN)$

Příklad – klasifikace pomocí FLDA

Subjekt	Skutečnost	Výsledek LDA
1	P	P
2	P	P
3	P	K
4	K	K
5	K	P
6	K	K

Výsledek klasifikace	Skutečnost (správná třída)	
	Pacienti (+)	Kontroly (-)
Pacienti (+)	TP=2	FP=1
Kontroly (-)	FN=1	TN=2

Senzitivita: $TP/(TP+FN)=2/(2+1)=0,67$

Specifická: $TN/(FP+TN)=2/(1+2)=0,67$

Správnost: $(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)=(2+2)/(2+1+1+2)=0,67$

Chyba: $(FP+FN)/(TP+FP+FN+TN)=(1+1)/(2+1+1+2)=0,33$

Intervaly spolehlivosti pro celkovou správnost

- celková správnost: $\frac{TP+TN}{TP+FP+FN+TN}$
- z toho plyne: $\hat{P}_A = \frac{N_{cor}}{N}$ (tedy $N_{cor} \sim Bi(N, P_A)$)
- za splnění předpokladů, že $\hat{P}_A \cdot N > 5$, $(1 - \hat{P}_A) \cdot N > 5$ a $N > 30$, lze spočítat 95% interval spolehlivosti pro správnost pomocí aproximace na normální rozdělení:

$$\left[\hat{P}_A - 1,96 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_A(1 - \hat{P}_A)}{N}}; \hat{P}_A + 1,96 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_A(1 - \hat{P}_A)}{N}} \right]$$

Příklad – pokračování

Správnost: $(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN) = 0,67$

IS pro správnost:
$$\left[\hat{P}_A - 1,96 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_A(1-\hat{P}_A)}{N}}; \hat{P}_A + 1,96 \cdot \sqrt{\frac{\hat{P}_A(1-\hat{P}_A)}{N}} \right]$$
$$\left[0,66 - 1,96 \cdot \sqrt{\frac{0,66(1-0,66)}{6}}; 0,66 + 1,96 \cdot \sqrt{\frac{0,66(1-0,66)}{6}} \right]$$
$$[0,29;1,00]$$

Trénovací a testovací data

1. resubstituce
2. náhodný výběr s opakováním (bootstrap)
3. predikční testování externí validací (hold-out)
4. křížová validace (cross validation)
 - k -násobná (k -fold)
 - „odlož-jeden-mimo“ (leave-one-out, jackknife)

1. resubstituce

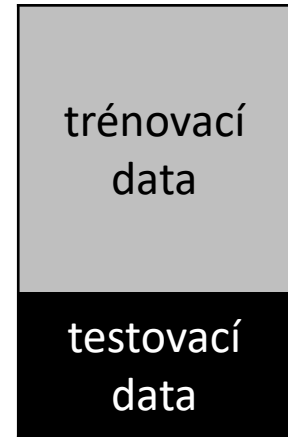
- stejná trénovací a testovací množina
- **výhody:**
 - + jednoduché
 - + rychlé
- **nevýhody:**
 - příliš optimistické výsledky!!!

2. náhodný výběr s opakováním (bootstrap)

- náhodně vybereme N subjektů s opakováním jako trénovací data (tzn. subjekty se v trénovací sadě mohou opakovat) a zbylé subjekty (ani jednou nevybrané) použijeme jako testovací data
- pro rozumně velká data se vybere zhruba 63,2% subjektů pro učení a 36,8% subjektů pro testování
- trénování a testování se provede jen jednou
- **výhody:**
 - + velká trénovací sada
 - + rychlé
- **nevýhody:**
 - data se v trénovací sadě opakují
 - výsledek vcelku závislý na výběru trénovacích dat

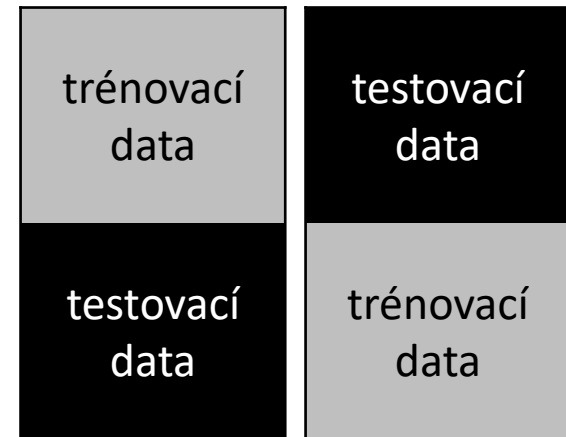
3. predikční testování externí validací (hold-out)

- použití části dat (většinou dvou třetin) na trénování a zbytku dat (třetiny) na testování
- **výhody:**
 - + nezávislá trénovací a testovací sada
- **nevýhody:**
 - méně dat pro trénování i testování
 - výsledek velmi závislý na výběru trénovacích dat



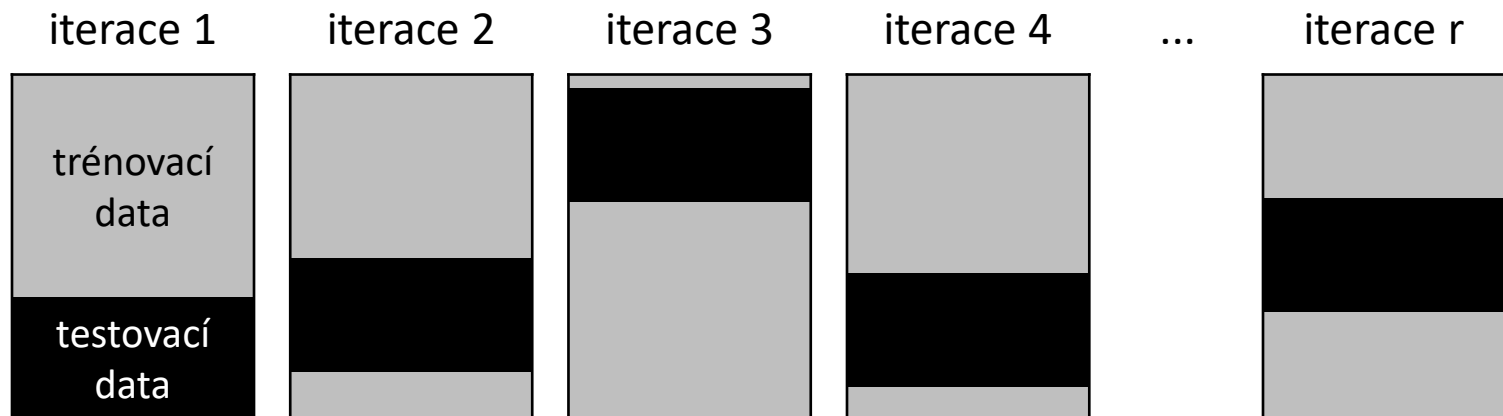
3. predikční testování externí validací (hold-out) – modifikace 1

- použití části dat (obvykle poloviny) pro trénování a zbytku (poloviny) pro testování a následné přehození testovací a trénovací sady → zprůměrování 2 výsledků klasifikace
- **výhody:**
 - + nezávislá trénovací a testovací sada
- **nevýhody:**
 - při malých souborech může být polovina dat pro trénování příliš málo
 - výsledek velmi závislý na výběru trénovacích dat (i když trochu méně než předtím)



3. predikční testování externí validací (hold-out) – modifikace 2

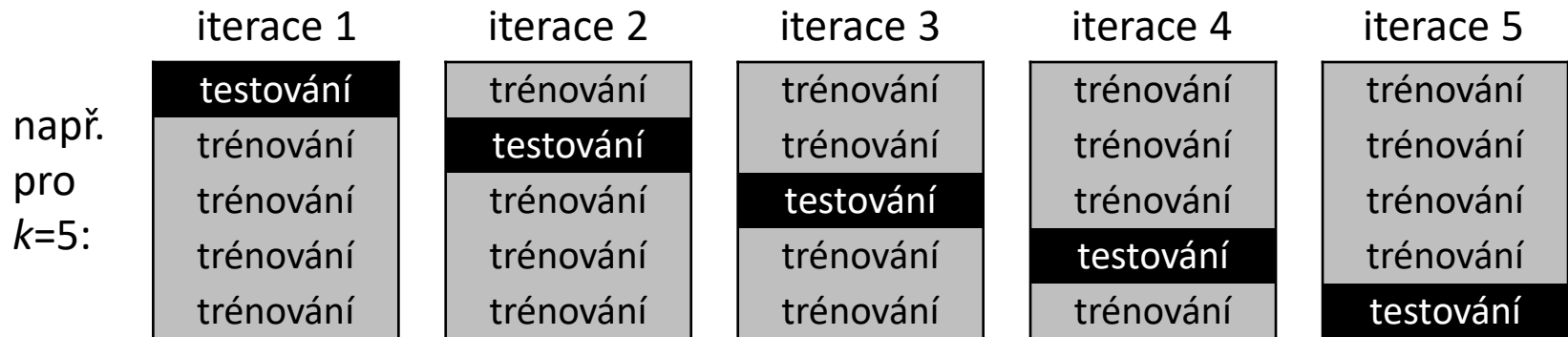
- r -krát náhodně rozdělíme soubor na trénovací a testovací data (většinou dvě třetiny pro trénování a třetinu pro testování) a r výsledků zprůměrujeme



- **výhody:**
 - + poměrně přesný odhad úspěšnosti klasifikace
- **nevýhody:**
 - trénovací i testovací sady se překrývají
 - časově náročné

4. k -násobná křížová validace (k -fold cross validation)

- používán též název příčná validace
- rozdělení souboru na k částí, 1 část použita na testování a zbylých $k-1$ částí na trénování → postup se opakuje (všechny části 1x použity pro testování)
- speciálním případem je „odlož-jeden-mimo“ (leave-one-out) CV (pro $k=N$)



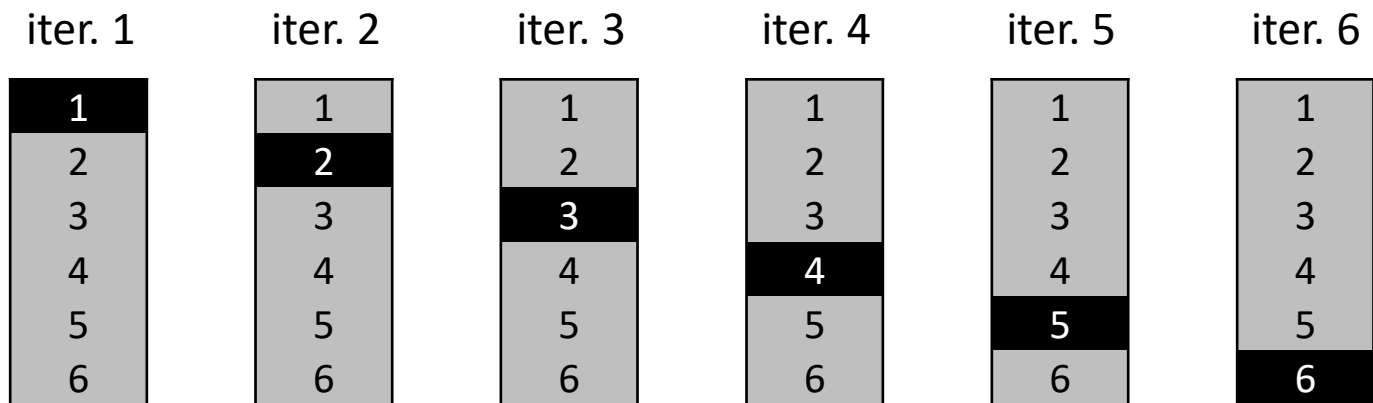
- **výhody:**
 - + testovací sady se nepřekrývají
 - + poměrně přesný odhad úspěšnosti klasifikace
- **nevýhody:**
 - časově náročné

„odlož-jeden-mimo“ křížová validace

- anglický překlad: leave-one-out (nebo jackknife)
- pro $k=N$ (tzn. v každé z N iterací je jeden subjekt použit na testování a zbylých $N-1$ subjektů na trénování)
- platí výhody a nevýhody zmíněné u k -násobné křížové validace se čtyřmi komentáři:
 - časově nejnáročnější ze všech možných k
 - velmi vhodná pro malé soubory dat
 - na rozdíl od jakékoliv k -fold CV dostaneme vždy pouze jeden výsledek úspěšnosti (tzn. výsledek úspěšnosti nezávisí na tom, jak se jednotlivé subjekty „namíchají“ do jednotlivých skupin)
 - v některých člancích se uvádí, že lehce nadhodnocuje úspěšnost → doporučuje se 10-násobná křížová validace

Příklad - „odlož-jeden-mimo“ křížová validace

Iterace:



Skutečnost:

pacient pacient pacient kontrola kontrola kontrola

Výsledek
klasifikace:

pacient kontrola kontrola kontrola pacient kontrola

Výsledek klasifikace	Skutečnost	
	pac.	kont.
pacient	TP=1	FP=1
kontrola	FN=2	TN=2

Senzitivita: $1/(1+2)=0,33$

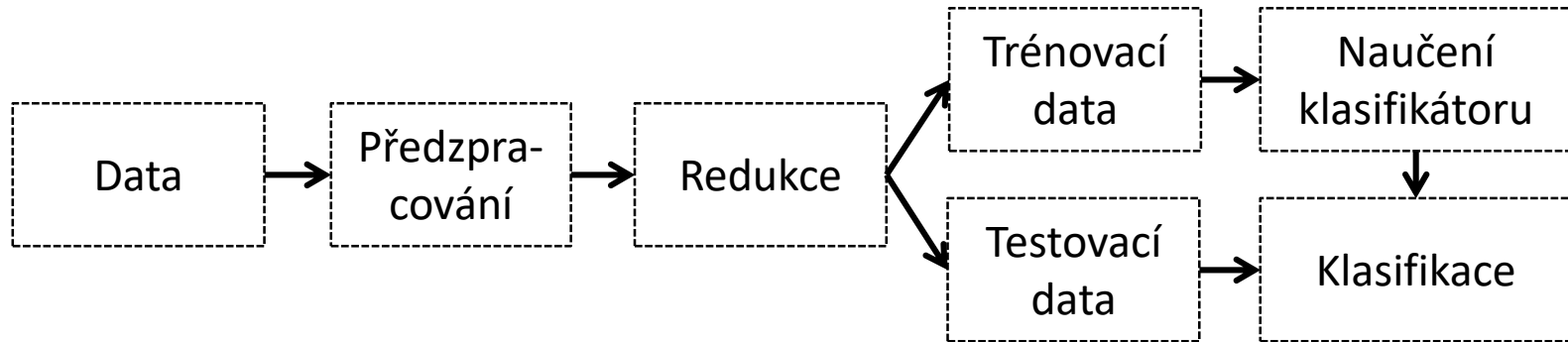
Specifická: $2/(1+2)=0,67$

Správnost: $(1+2)/(1+1+2+2)=0,50$

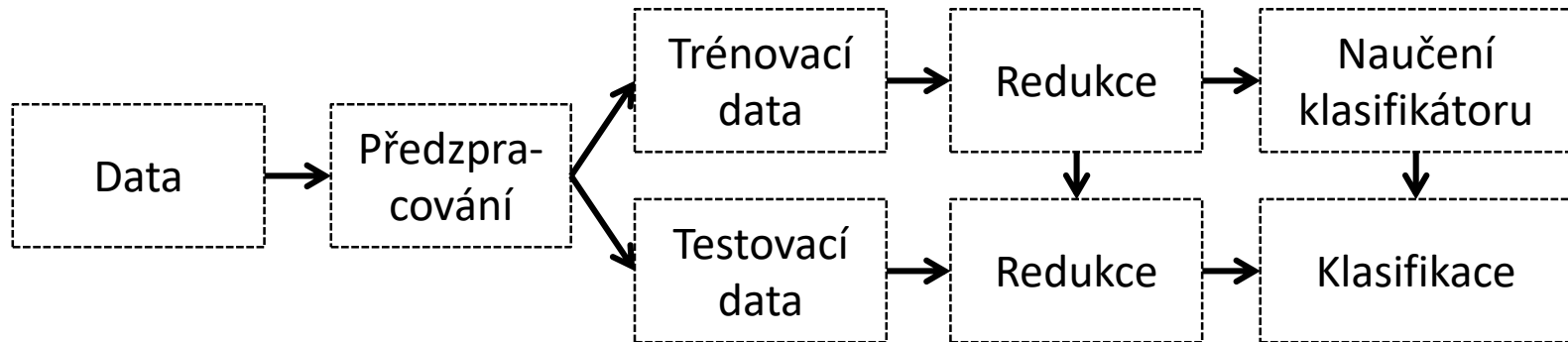
Chyba: $(1+2)/(1+1+2+2)=0,50$

Upozornění !!!

Postup 1:



Postup 2:



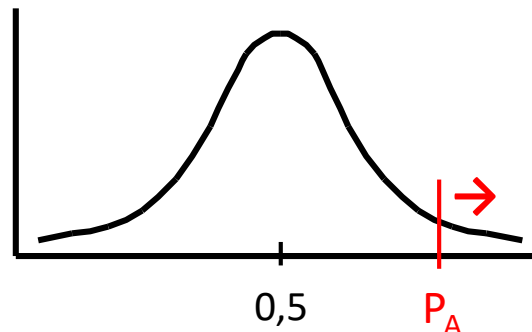
Postup 1 je nesprávný, je potřebné rozdělit soubor na trénovací a testovací ještě před redukcí dat, jinak dostaneme nahodnocené výsledky!!!

Je klasifikace lepší než náhodná klasifikace?

- permutační testování
- jednovýběrový binomický test

Permutační testování

- r-krát náhodně přeházíme identifikátory příslušnosti do skupin u subjektů a provedeme klasifikaci (se stejným nastavením jako při použití originálních dat)
- p-hodnota se vypočte jako: n/r , kde n je počet iterací, v nichž byla úspěšnost klasifikace (např. celková správnost) vyšší nebo rovna úspěšnosti klasifikace originálních dat (P_A)
- pozn. pokud histogram z r celkových správností získaných permutacemi neleží kolem 0,5 (v případě vyrovnaných skupin), máme v algoritmu zřejmě někde chybu!



Jednovýběrový binomický test

- testujeme, zda se liší celková správnost (což je podíl správně zařazených subjektů) od správnosti získané náhodnou klasifikací
- správnost u náhodné klasifikace: $P_{A_0} = N_i/N$, kde N_i je počet subjektů nejpočetnější skupiny
- $$Z = \frac{P_A - P_{A_0}}{\sqrt{(P_{A_0}(1 - P_{A_0}))/N}}$$
- Pokud $|z| > 1,96$, zamítáme nulovou hypotézu o shodnosti správnosti naší klasifikace a správnosti náhodné klasifikace

Příklad – jednovýběrový binomický test

- uvažujme např. výsledek klasifikace pacientů a kontrol pomocí LDA (pomocí resubstituce): $P_A = 0,67$, $N = 6$, $P_{A_0} = N_i/N = 0,5$
- $$Z = \frac{P_A - P_{A_0}}{\sqrt{(P_{A_0}(1 - P_{A_0}))/N}} = \frac{0,67 - 0,5}{\sqrt{(0,5(1 - 0,5))/6}} = 0,83$$
- protože $|z| < 1,96$, nezamítáme nulovou hypotézu o shodnosti správnosti naší klasifikace a správnosti náhodné klasifikace (tzn. neprokázali jsme, že by naše klasifikace byla lepší než náhodná klasifikace)
- nezamítnutí nulové hypotézy vyplývá už i z vypočteného intervalu spolehlivosti (0,29 – 1,00), protože tento interval spolehlivosti obsahuje hodnotu 0,5

Srovnání úspěšnosti klasifikace

- Srovnání 2 klasifikátorů
- Srovnání 3 a více klasifikátorů

Srovnání 2 klasifikátorů

Klasifikátor 1	Klasifikátor 2	
	Správně (1)	Chybně (0)
Správně (1)	N_{11}	N_{10}
Chybně (0)	N_{01}	N_{00}

Celkem:

$$N_{11} + N_{10} + N_{01} + N_{00} = N_{ts}$$

McNemarův test:

$$\chi^2 = \frac{(|N_{01} - N_{10}| - 1)^2}{N_{01} + N_{10}}$$

Pokud $\chi^2 > 3,841$, zamítáme nulovou hypotézu H_0 o shodnosti celkové správnosti klasifikace pomocí dvou klasifikátorů

Dvouvýběrový binomický test:

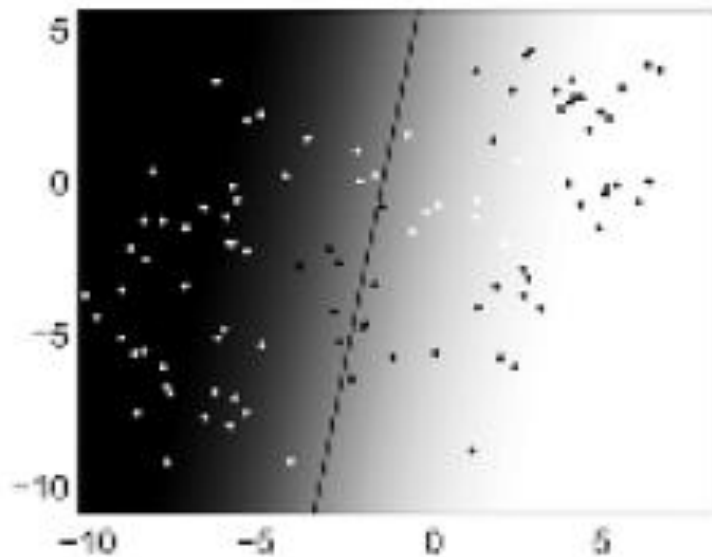
$$z = \frac{p_1 - p_2}{\sqrt{(2p(1-p))/(N_{ts})}} \quad p_1 = \frac{N_{11} + N_{10}}{N_{ts}}; \quad p_2 = \frac{N_{11} + N_{01}}{N_{ts}} \quad p = \frac{1}{2}(p_1 + p_2)$$

Pokud $|z| > 1,96$, zamítáme nulovou hypotézu H_0 o shodnosti podílu správně klasifikovaných subjektů dvou klasifikátorů

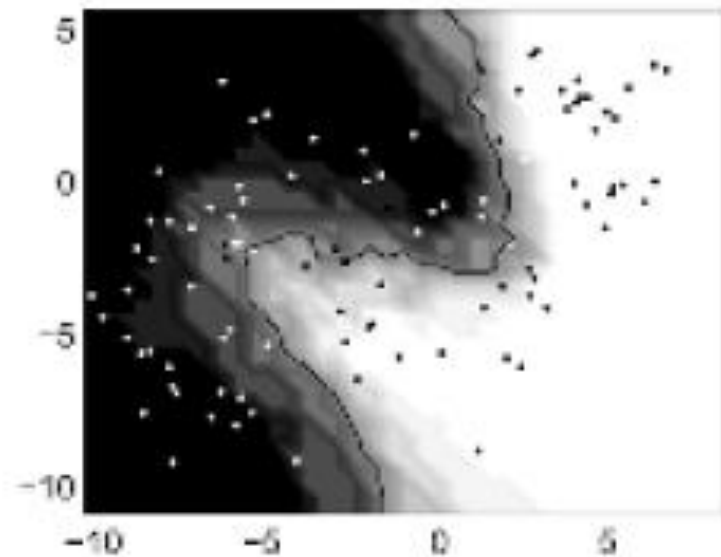
Dvouvýb. binomický test předpokládá nezávislost (tzn. že každý klasifikátor byl testován na jiném testovacím souboru) → raději používat McNemarův test

Příklad – srovnání 2 klasifikátorů

Lineární diskriminační
analýza (LDA)



Metoda 9 nejblížších
sousedů (9-nn)



Příklad – srovnání 2 klasifikátorů

Matice záměn:

	LDA		9-nn	
	42	8	44	6
	8	42	2	48
	84% správnost		92% správnost	

Shody u klasifikátorů:

Klasifikátor 1: LDA	Klasifikátor 2: 9-nn	
	Správně (1)	Chybně (0)
Správně (1)	$N_{11} = 82$	$N_{10} = 2$
Chybně (0)	$N_{01} = 10$	$N_{00} = 6$

McNemarův test:

$$\chi^2 = \frac{(|10 - 2| - 1)^2}{10 + 2} = \frac{49}{12} \approx 4.0833$$

Protože $\chi^2 > 3,841$, zamítáme H_0 .

Dvouvýb. binomický test:

$$z = \frac{0.84 - 0.92}{\sqrt{(2 \times 0.88 \times 0.12)/(100)}} \approx -1.7408$$

Protože $|z| < 1,96$, nezamítáme H_0 .

Srovnání 3 a více klasifikátorů

Testuje se, zda jsou statisticky významně odlišné správnosti klasifikátorů měřené na stejných testovacích datech – tzn. $H_0: p_1 = p_2 = \dots = p_L$, kde p_L je správnost L-tého klasifikátoru. Poté je možno srovnávat správnosti klasifikátorů vždy po dvou, aby se zjistilo, které klasifikátory se od sebe liší.

Cochranův Q test:

$$Q_C = (L - 1) \frac{L \sum_{i=1}^L G_i^2 - T^2}{LT - \sum_{j=1}^{N_{ts}} (L_j)^2}$$

Pokud $Q_C > \chi^2(L - 1)$, zamítáme H_0 .

F-test:

$$F_{cal} = \frac{MSA}{MSAB}$$

Pokud $F_{cal} > F(L - 1, (L - 1) \times (N_{ts} - 1))$, zamítáme H_0 .

Looney doporučuje F-test, protože je méně konzervativní.

S. W. Looney. A statistical technique for comparing the accuracies of several classifiers.
Pattern Recognition Letters, 8:5–9, 1988.

Příklad – srovnání 3 a více klasifikátorů

	LDA		9-nn		Parzen	
Matrice záměn:	42	8	44	6	47	3
	8	42	2	48	5	45
	84% správnost		92% správnost		92% správnost	

Cochranův Q test:
$$Q_C = 2 \times \frac{3 \times (84^2 + 92^2 + 92^2) - 268^2}{3 \times 268 - (80 \times 9 + 11 \times 4 + 6 \times 1)} \approx 3.7647$$

Protože $Q_C < \chi^2(L - 1) = 5,991$, nezamítáme H_0 .

F-test:
$$F_{cal} = \frac{0.2223}{0.0549} \approx 4.0492$$

Protože $F_{cal} > F(2; 198) = 3,09$, zamítáme H_0 .

Shrnutí

- výpočet úspěšnosti klasifikace (správnosti, chyby, senzitivity, specificity a přesnosti) pomocí matice záměn
- výpočet intervalu spolehlivosti pro správnost a chybu
- volba trénovacího a testovacího souboru:
 - resubstituce
 - náhodný výběr s opakováním (bootstrap)
 - predikční testování externí validací (hold-out)
 - křížová validace (cross validation): k-násobná, „odlož-jeden-mimo“
- srovnání úspěšnosti klasifikace s náhodnou klasifikací
 - permutační testování
 - jednovýběrový binomický test
- srovnání úspěšnosti klasifikace 2 klasifikátorů:
 - McNemarův test
 - dvouvýběrový binomický test
- srovnání úspěšnosti klasifikace 3 a více klasifikátorů:
 - Cochranův Q test
 - F-test

Příprava nových učebních materiálů pro obor Matematická biologie

je podporována projektem OPVK

č. CZ.1.07/2.2.00/28.0043

„Interdisciplinární rozvoj studijního
oboru Matematická biologie“



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ