Analýza a klasifikace dat – přednáška 6

RNDr. Eva Koriťáková, Ph.D.

© Institut biostatistiky a analýz

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**

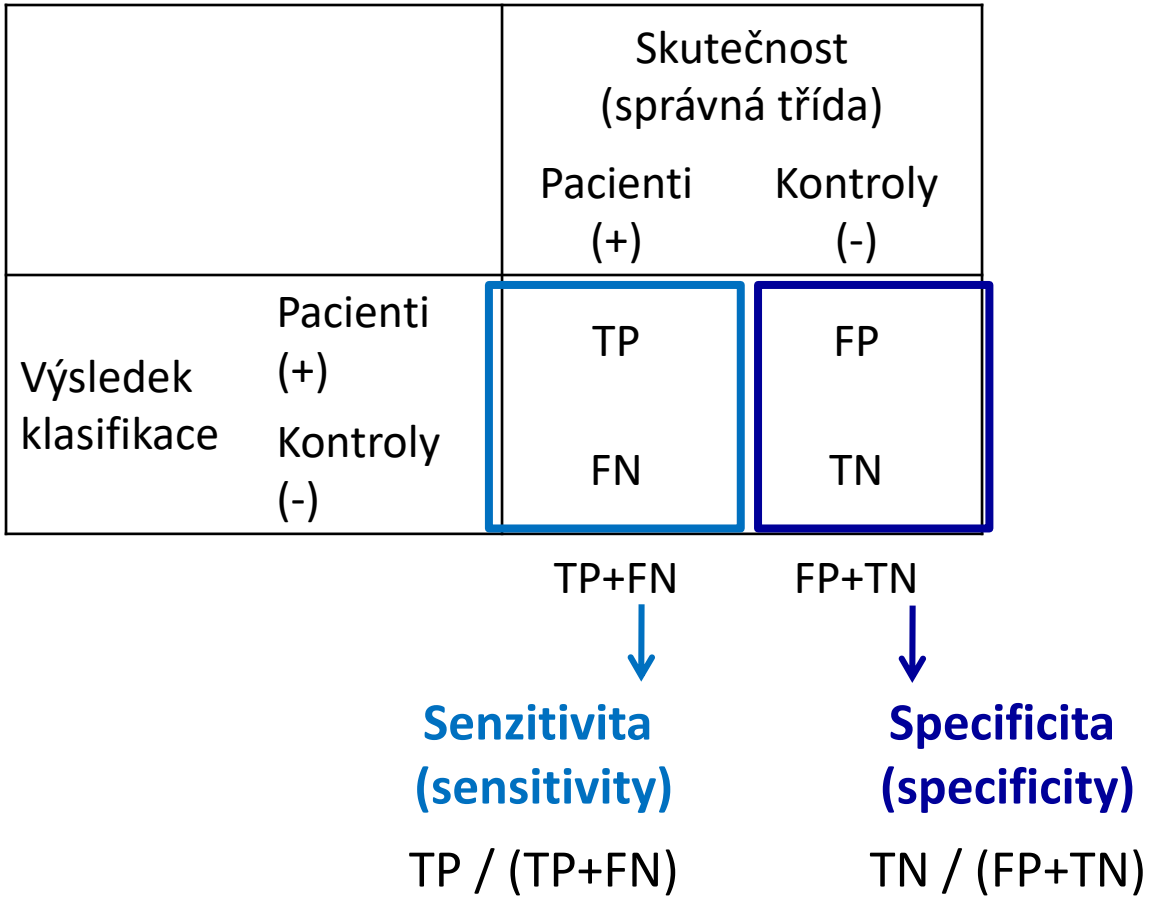
TP („true positive“) – kolik výsledků bylo skutečně pozitivních
(tzn. kolik pacientů bylo správně diagnostikováno jako pacienti).

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



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

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

Příklad – klasifikace pomocí FLDA

Subjekt	Skuteč-nost	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

Specificita: 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 $\hat{P}_A \cdot N > 5$, $\left(1 - \hat{P}_A\right) \cdot N > 5$ a $N > 30$, lze spočítat 95% interval spolehlivosti pro správnost pomocí aproximace na normální rozdělení:

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

Příklad – pokračování

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

IS pro správnost:

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

$$\left[0{,}66 - 1{,}96 \cdot \sqrt{\frac{0{,}66(1-0{,}66)}{6}}; 0{,}66 + 1{,}96 \cdot \sqrt{\frac{0{,}66(1-0{,}66)}{6}}\right]$$

$$[0{,}29; 1{,}00]$$

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)

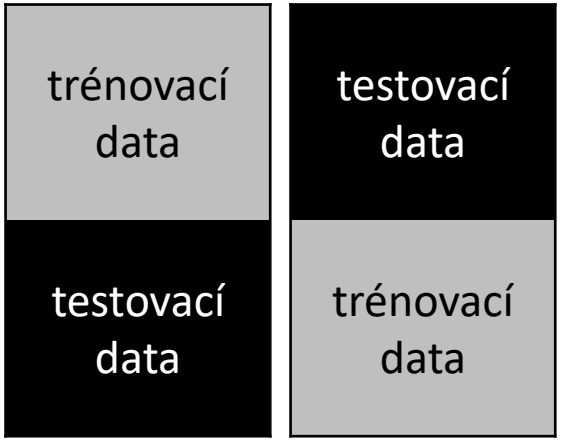
- použití části dat (většinou dvou třetin) na trénování a zbytku dat (třetiny) na testování

- **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 → zprů-měrování 2 výsledků klasifikace

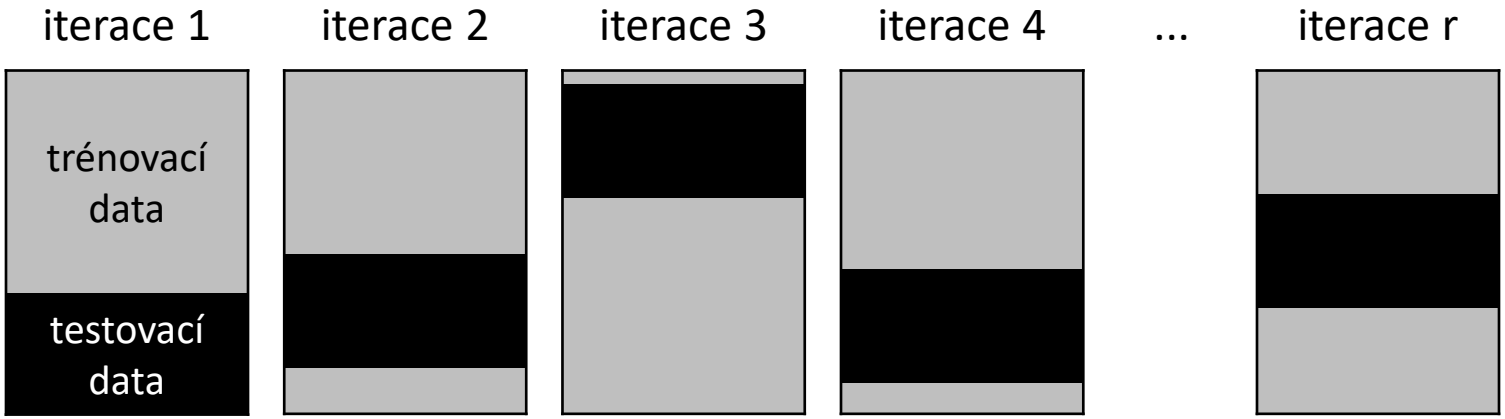


- **výhody:**
  + nezávislá trénovací a testovací sada

- **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

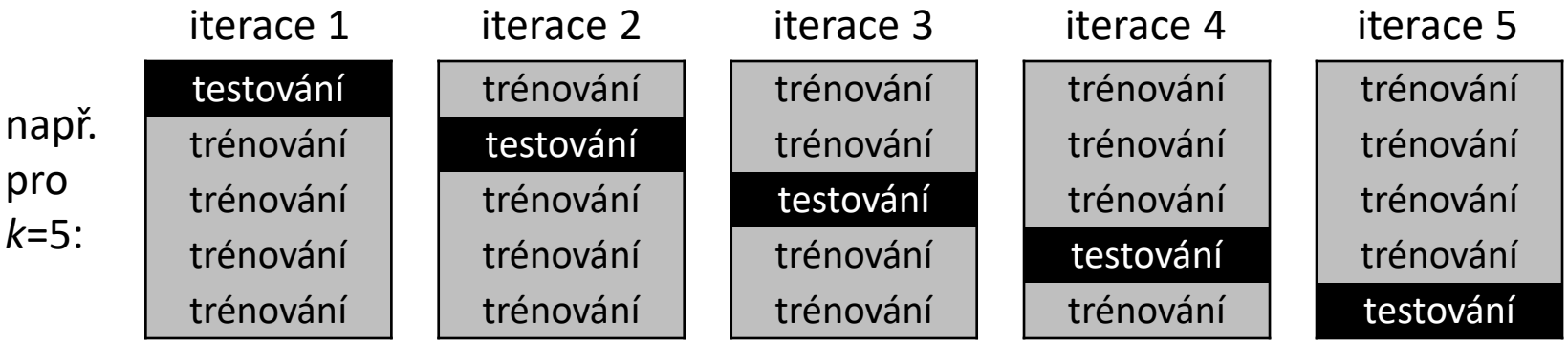
- *r*-krát náhodně rozdělíme soubor na trénovací a testovací data (většinou dvě třetiny pro trénování a třetinu pro testování) a *r* výsledků zprůměrujeme



- **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)



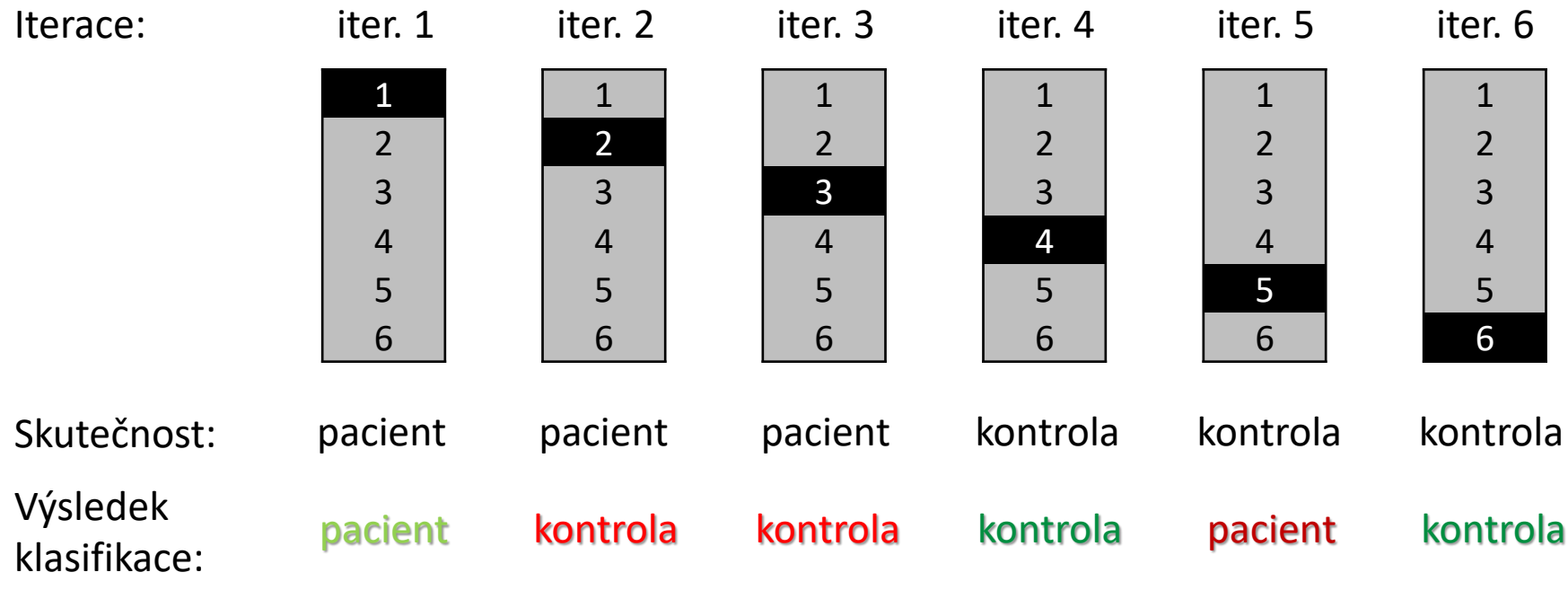
- **výhody:**
  + testovací sady se nepřekrývají
  + poměrně přesný odhad úspěšnosti klasifikace

- **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 článcích se uvádí, že lehce nadhodnocuje úspěšnost → doporučuje se 10-násobná křížová validace

Příklad - „odlož-jeden-mimo“ křížová validace



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

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

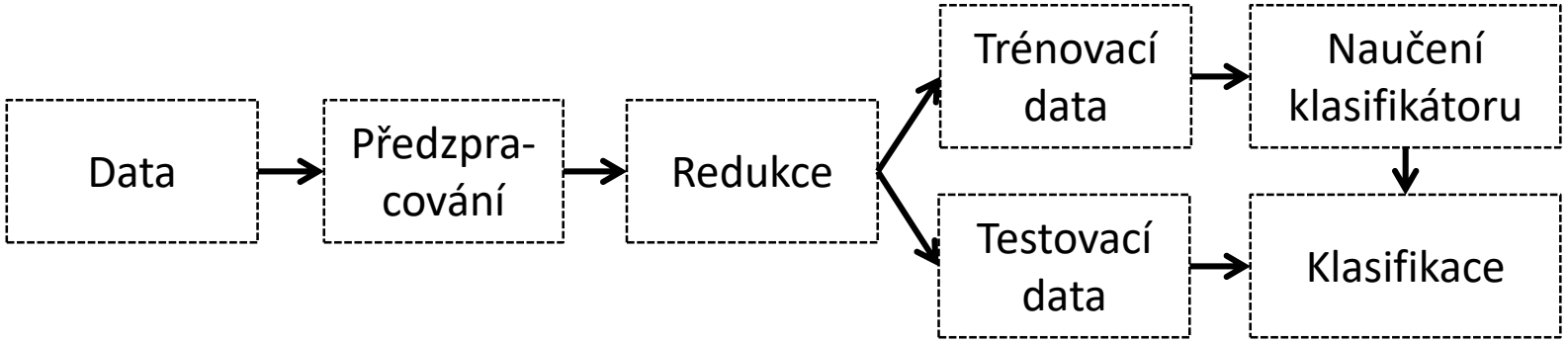
Specificita: 2/(1+2)=0,67

Správnost: (1+2)/(1+1+2+2)=0,50

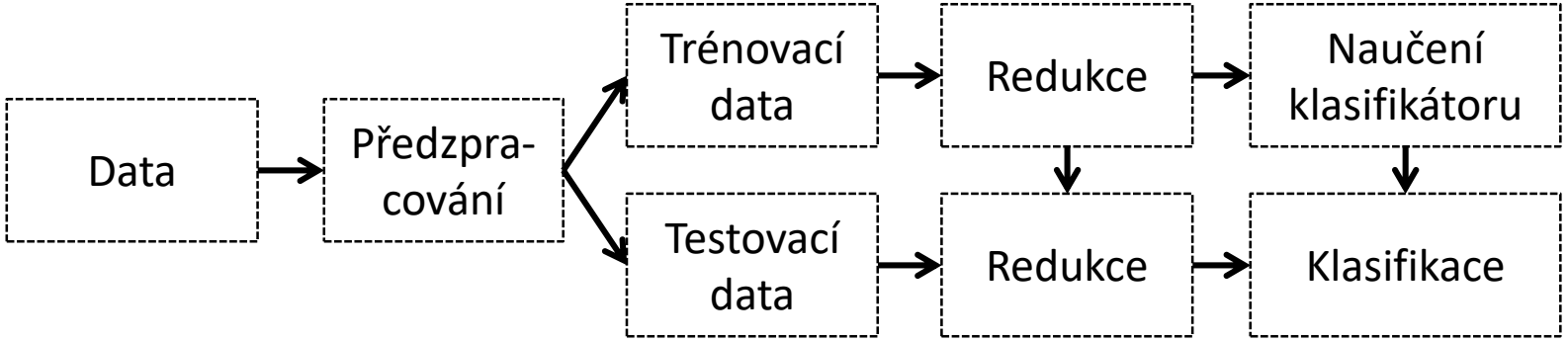
Chyba: (1+2)/(1+1+2+2)=0,50

Upozornění !!!

Postup 1:



Postup 2:



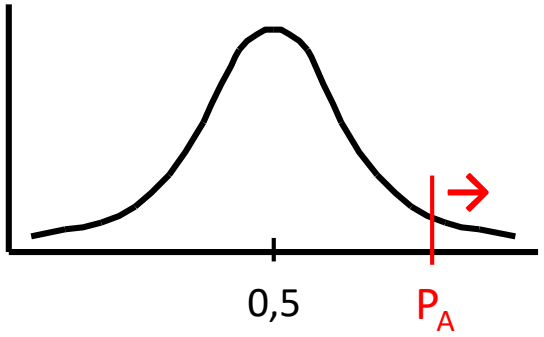
Postup 1 je nesprávný, je potřebné rozdělit soubor na trénovací a testovací ještě před redukcí dat, jinak dostaneme nadhodnocené výsledky!!!

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
- $z = \frac{P_A - P_{A_0}}{\sqrt{\left(P_{A_0}(1-P_{A_0})\right)/N}}$
- 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): $P_A = 0{,}67$, $N = 6$, $P_{A_0} = {}^{N_i}/_{N} = 0{,}5$
- $z = \frac{P_A - P_{A_0}}{\sqrt{\left(P_{A_0}(1-P_{A_0})\right)/N}} = \frac{0{,}67-0{,}5}{\sqrt{\left(0{,}5(1-0{,}5)\right)/6}} = 0{,}83$
- 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: $$x^2 = \frac{(|N_{01} - N_{10}| - 1)^2}{N_{01} + N_{10}}$$

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

Dvouvýběrový binomický test:

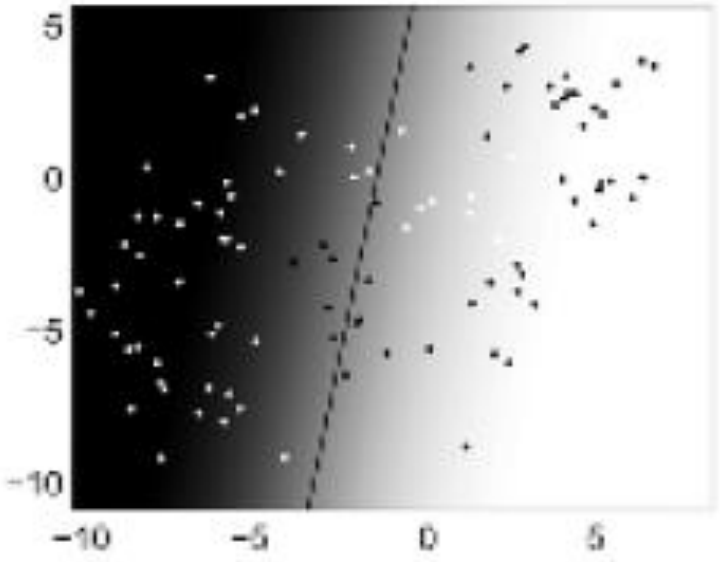
$$z = \frac{p_1 - p_2}{\sqrt{(2p(1-p))/(N_{ts})}} \qquad p_1 = \frac{N_{11} + N_{10}}{N_{ts}}; \qquad p_2 = \frac{N_{11} + N_{01}}{N_{ts}} \qquad p = \tfrac{1}{2}(p_1 + p_2)$$

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

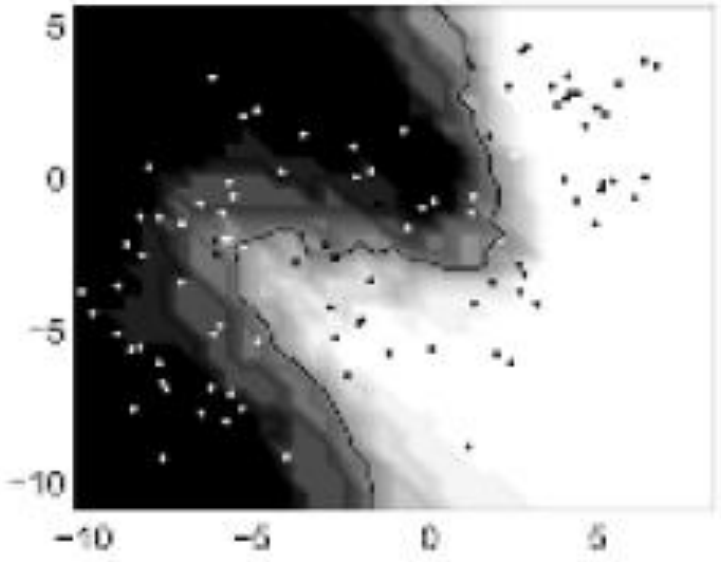
Dvouvýb. binomický test předpokládá nezávislost (tzn. že každý klasifikátor byl testován na jiném testovacím souboru) → raději používat McNemarův test

Příklad – srovnání 2 klasifikátorů

Lineární diskriminační analýza (LDA)



Metoda 9 nejbližších 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:

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

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

Dvouvýb. binomický test:

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

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: $p_1 = p_2 = \cdots = p_L$, 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:

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

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

Matice záměn:

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

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

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

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

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

Shrnutí

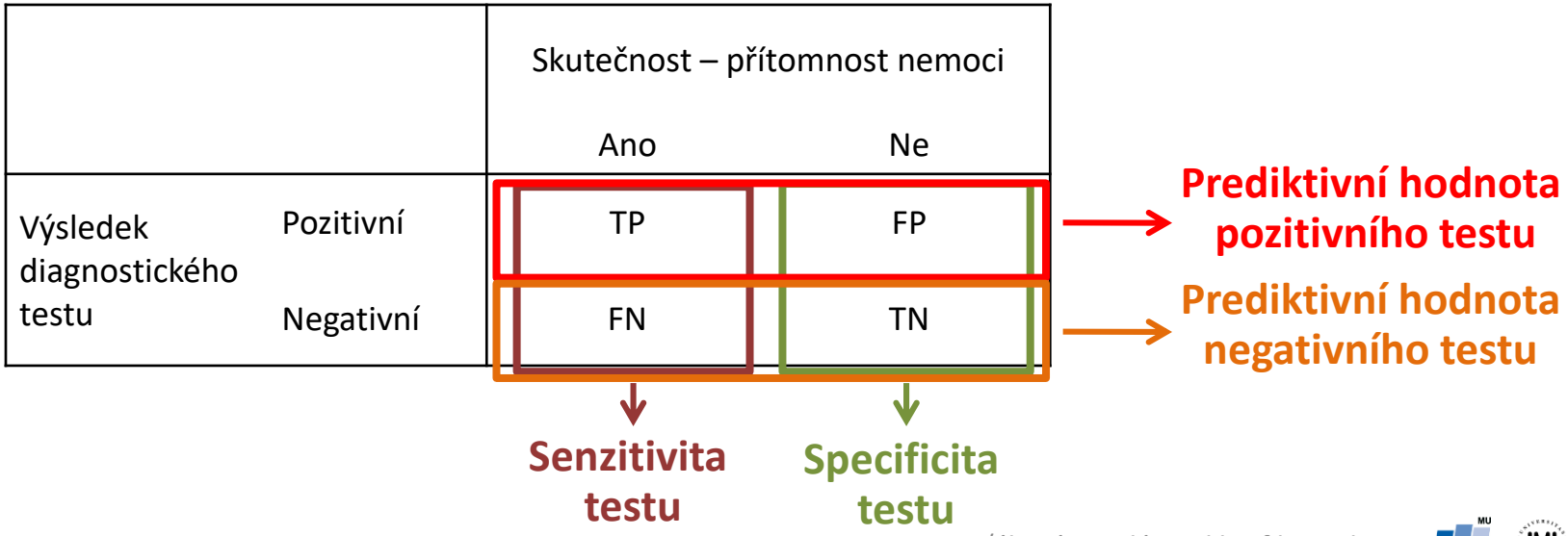
- výpočet úspěšnosti klasifikace (správnosti, chyby, senzitivity, specificity a přesnosti) pomocí matice záměn
- výpočet intervalu spolehlivosti pro správnost a chybu
- volba trénovacího a testovacího souboru:
  - resubstituce
  - náhodný výběr s opakováním (bootstrap)
  - predikční testování externí 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

Hledání diagnostického cut-off pomocí ROC křivek

Diagnostické testy

- Příklady: hodnocení úspěšnosti diagnostiky pomocí neuropsychologických testů, hodnocení úspěšnosti klasifikace pacientů s Alzheimerovou chorobou a kontrolních subjektů.

- Diagnostický test u dané osoby indikuje přítomnost nebo nepřítomnost sledovaného onemocnění.
- Osoba ve skutečnosti má nebo nemá sledované onemocnění.
  → **Zajímají nás diagnostické schopnosti testu.**



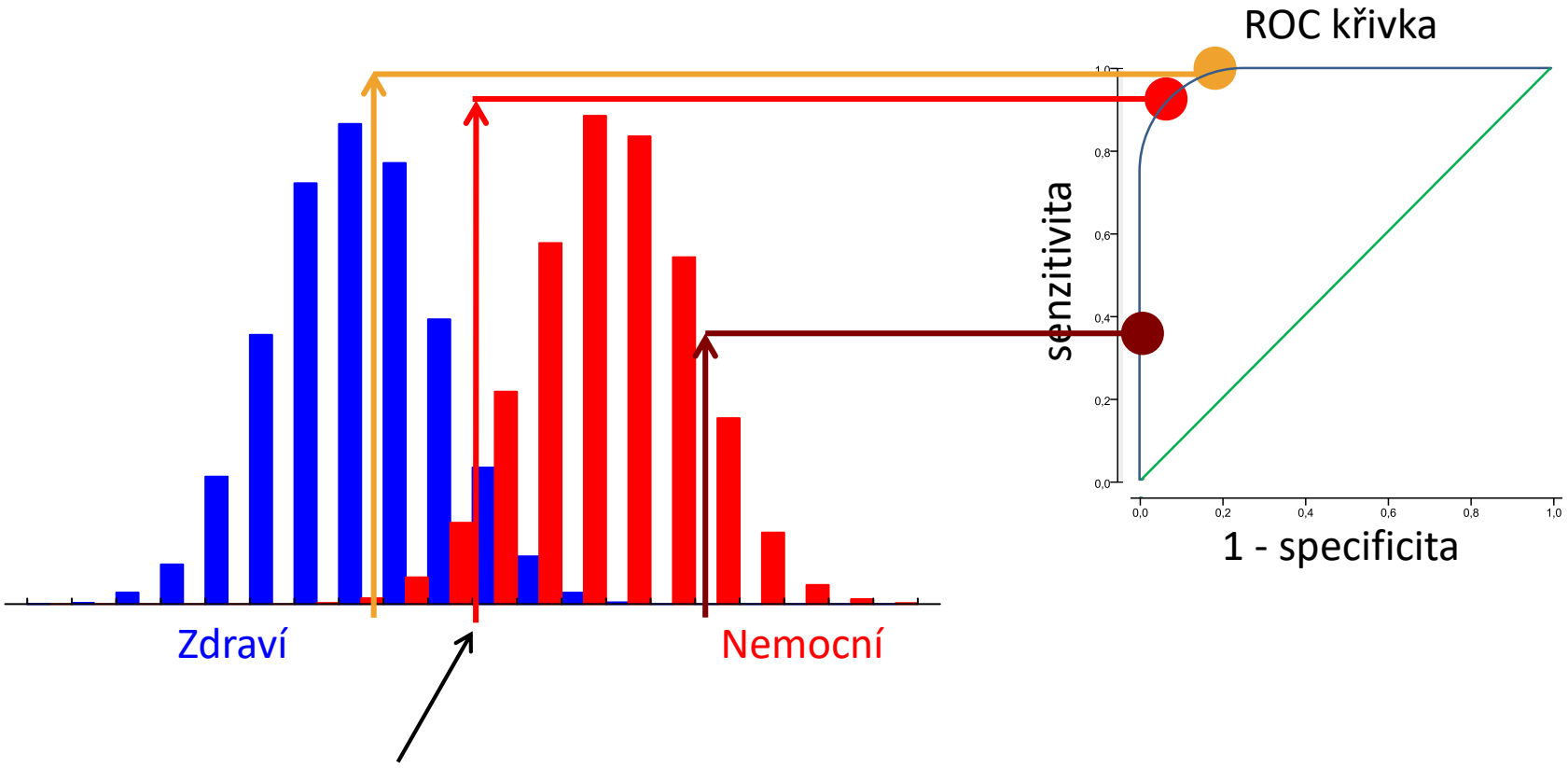
ROC analýza – motivace

- Výše zmíněné ukazatele diagnostické síly testů (senzitivita, specificita apod.) **nelze použít u diagnostických testů, jejichž výstupem je spojitá (kvantitativní) proměnná** (např. koncentrace analytu v krevním séru, systolický krevní tlak).
- Výhoda, pokud na základě předchozích výzkumů známe dělicí body, které odlišují normální a patologické hodnoty spojité proměnné, pomocí nichž můžeme spojitou proměnnou binarizovat – tzn. vytvoření dvou kategorií „pozitivní“ / „negativní“ (např. „pod normou“ / „v normě“).
- Pokud dělicí body nejsou známy předem, můžeme se je snažit nalézt pomocí **ROC („Receiver Operating Characteristic“) křivky**.

- **Cíle ROC analýzy:**
  1. Určit, zda je spojitá proměnná vhodná pro diagnostické odlišování zdravých a nemocných jedinců.
  2. Nalezení dělicího bodu („cut-off point“) na škále hodnot spojité proměnné, který nejlépe odlišuje zdravé a nemocné jedince.

ROC analýza

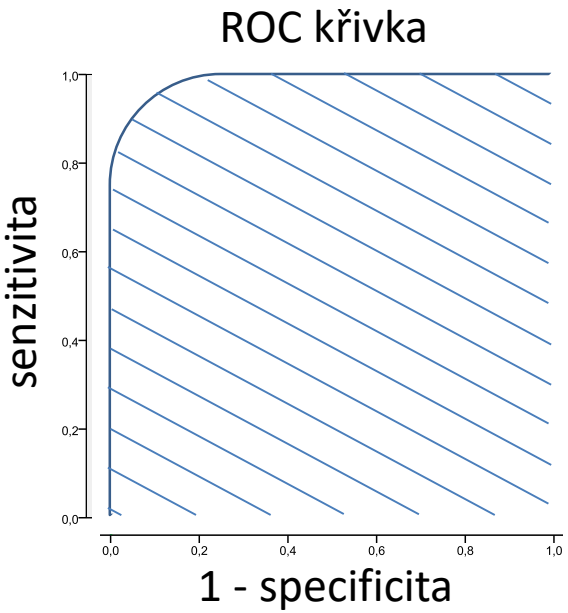
- Princip: Jakákoli hodnota spojité proměnné nějak rozlišuje zdravé a nemocné jedince, tzn. je spojena s nějakou senzitivitou a specificitou.



Nejlepší dělící bod („cut-off“) – nejvyšší sensitivita a specificita pro odlišení skupin – tzn. maximální součet hodnot senzitivity a specificity.

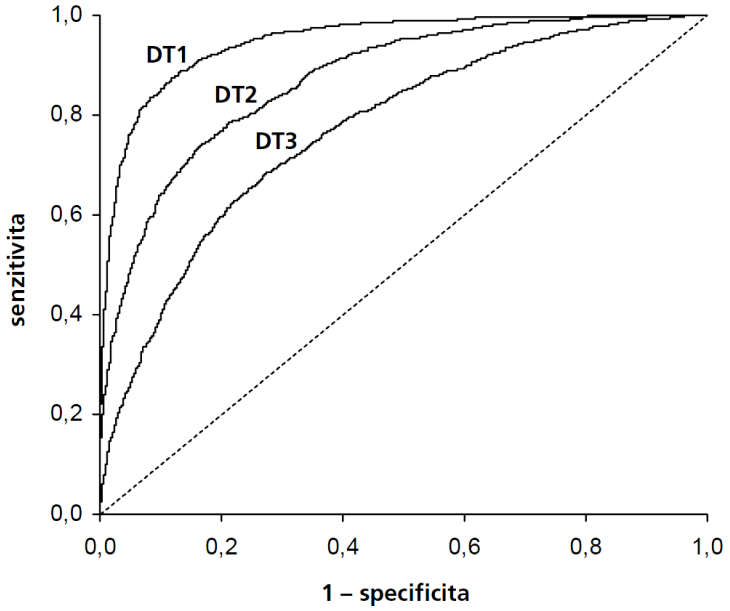
ROC analýza – plocha pod ROC křivkou

- Plocha pod ROC křivkou = „Area Under the Curve“ (AUC).
- Nabývá hodnot od 0 do 1.
- Slouží k vyjádření diagnostické síly (efektivity) testu.
- Čím větší hodnota AUC, tím lepší diagnostický test je (hodnota AUC nad 0,75 většinou poukazuje na uspokojivou diskriminační schopnost testu).



ROC analýza – srovnání diagnostické síly různých testů

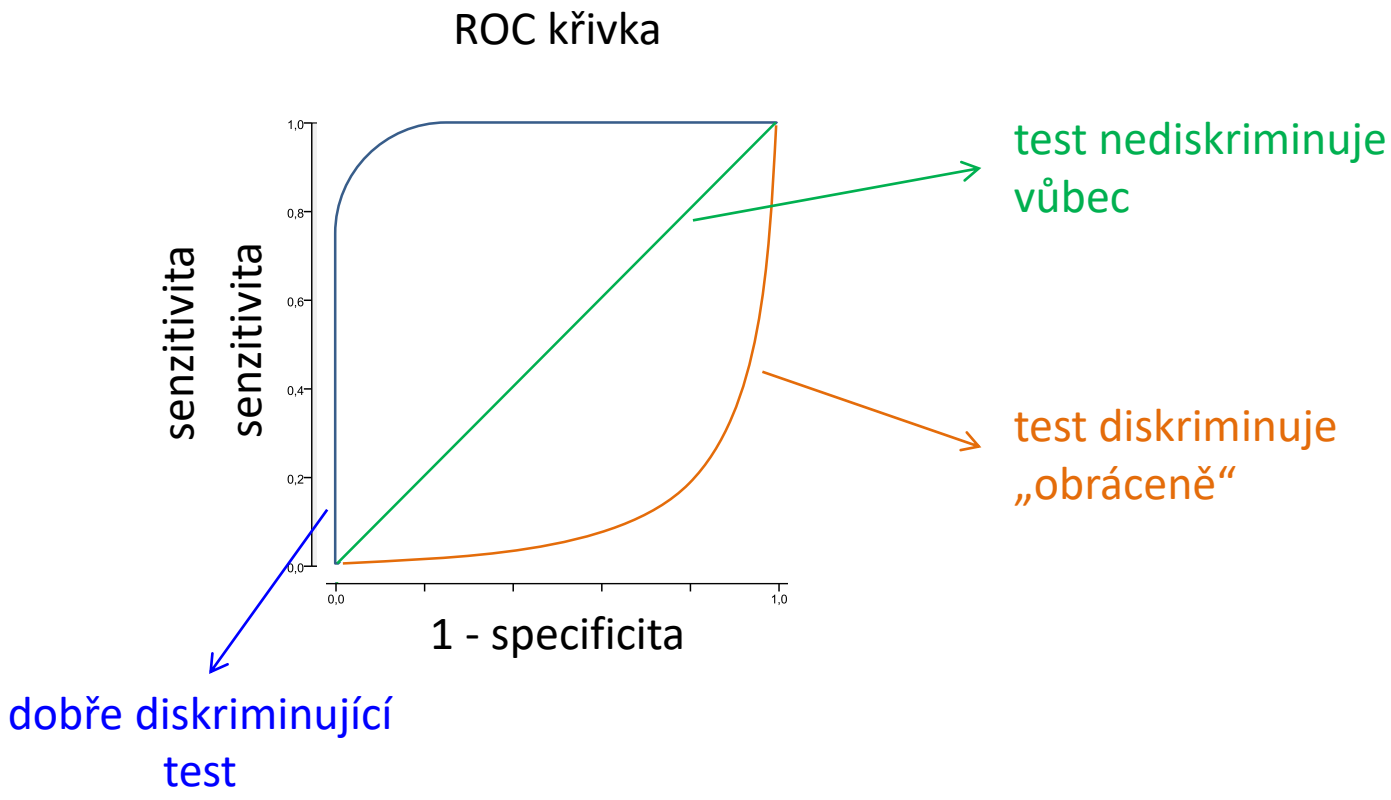
- Lze srovnat i velmi rozdílné testy (např. testy založené na různých proměnných).



Diagnostický test	AUC	
DT1	0,949	→ nejlepší
DT2	0,872	
DT3	0,770	→ nejhorší

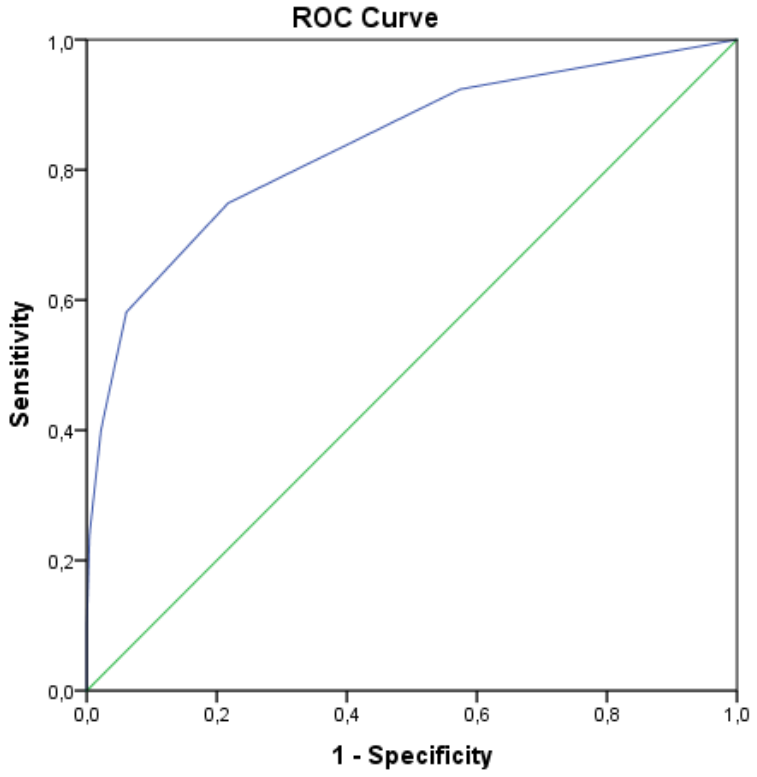
Zdroj: Dušek, Pavlík, Jarkovský, Koptíková, Analýza dat v Neurologii, Cesk Slov Neurol N 2011; 74/ 107(4)

ROC analýza – srovnání diagnostické síly různých testů



ROC analýza – příklad

Příklad: Zjistěte, zda je MMSE skóre vhodné na diagnostiku mírné kognitivní poruchy (MCI). Najděte dělící bod (cut-off), který nejlépe odlišuje pacienty s MCI od kontrolních subjektů.



Area Under the Curve

Test Result Variable(s): MMSE

Area	Std. Error[a]	Asymptotic Sig.[b]	Asymptotic 95% Confidence Interval	
			Lower Bound	Upper Bound
,838	,016	,000	,807	,868

Coordinates of the Curve

Test Result Variable(s):

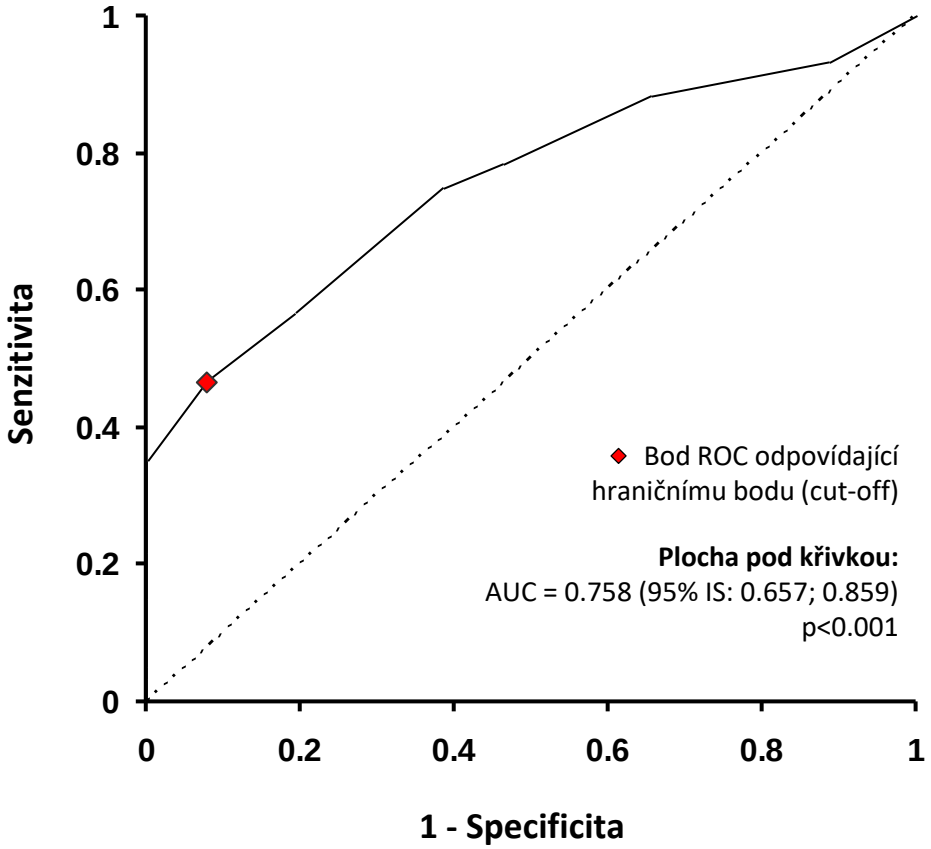
Positive if Less Than or Equal To[a]	Sensitivity	1 - Specificity	Specificity	Sensitivity + Specificity
22.00	0.000	0.000	1.000	1.000
23.50	0.002	0.000	1.000	1.002
24.50	0.101	0.000	1.000	1.101
25.50	0.239	0.004	0.996	1.235
26.50	0.399	0.022	0.978	1.377
27.50	0.581	0.061	0.939	1.520
28.50	0.749	0.217	0.783	1.531
29.50	0.924	0.574	0.426	1.350
31.00	1.000	1.000	0.000	1.000

ROC analýza – řešení v softwaru SPSS

- Analyze – ROC Curve – zadat Test Variable a State Variable (jako Value of State Variable zadat rizikovou kategorii)
- na záložce Options lze zvolit, zda „Larger test result indicates more positive test“ nebo „Smaller test result indicates more positive test“ – Continue
- zatržení „Standard error and confidence interval“ umožní k AUC vypočítat intervaly spolehlivosti a p-hodnotu
- zatržení „Coordinate points of the ROC Curve“ umožní získat tabulku se senzitivitou a 1-specificitou pro jednotlivé cut-off body (po zkopírování této tabulku do Excelu je možno vypočítat specificitu a nalézt nejlepší cut-off)

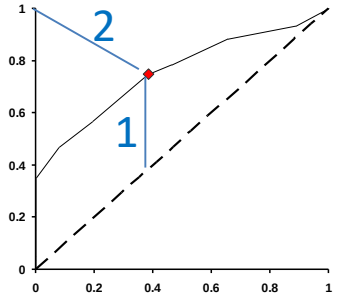
Hledání cut-off – doplnění

Příklad:



Sens	Spec	Sens+Spec
1.000	0.000	1.000
0.933	0.115	1.049
0.883	0.346	1.229
0.783	0.538	1.322
0.750	0.615	1.365
0.567	0.808	1.374
0.467	0.923	1.390
0.350	1.000	1.350
0.217	1.000	1.217
0.150	1.000	1.150
0.050	1.000	1.050
0.033	1.000	1.033
0.000	1.000	1.000

Hledání cut-off – kritéria



Kritérium	Vzoreček	Reference
1. Youdenova J statistika [1] – maximalizace vzdálenosti od diagonály	$\max(se + sp)$	• W. J. Youden (1950) "Index for rating diagnostic tests". Cancer, 3, 32–35. • R-kový balík pROC • http://www.medicalbiostatistics.com/roccurve.pdf
2. Nejbližší bod levému hornímu rohu grafu	$\min((1-se)^2+(1-sp)^2)$	• R-kový balík pROC • http://www.medicalbiostatistics.com/roccurve.pdf
3. Maximalizace součinu senzitivity a specificity	$\max(se * sp)$	• R-kový balík OptimalCutpoints • dr. Budíková používá maximalizaci geometrického průměru sens a spec

[1] Youdenova J statistika je definována jako: $J = se + sp - 1$; při hledání maxima lze ale člen (-1) zanedbat

Hledání cut-off – vážená kritéria (dle R balíku pROC)

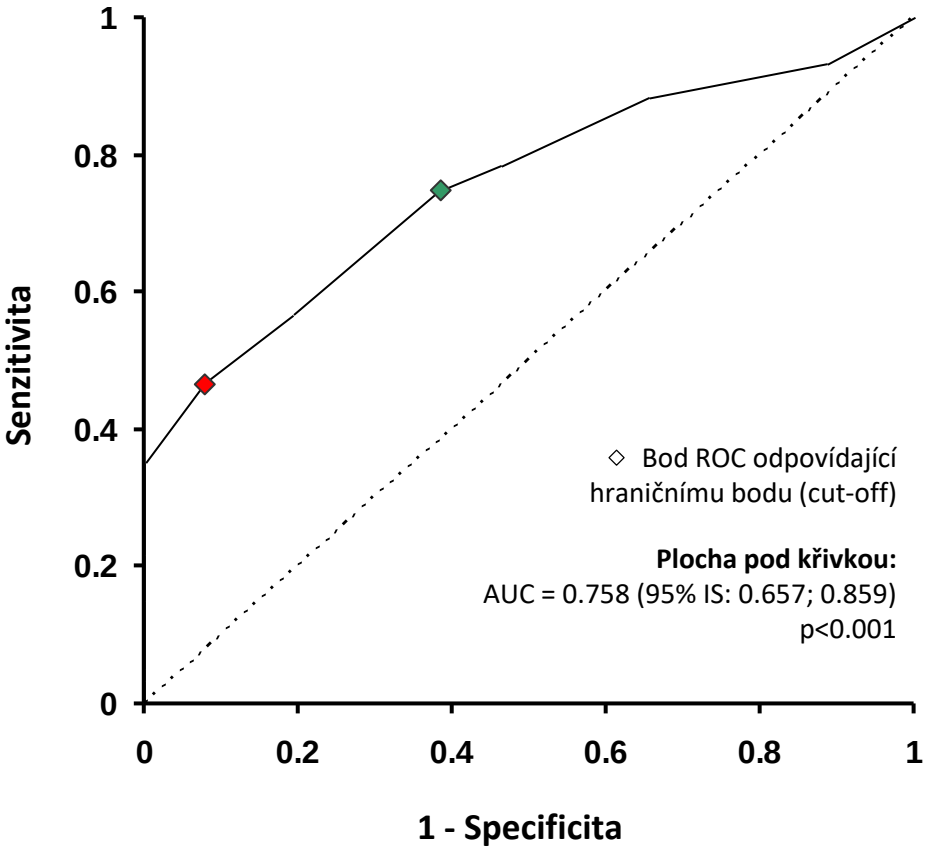
Kritérium	Vzoreček
Youdenova J statistika [1] – maximalizace vzdálenosti od diagonály	$\max(se + r * sp)$
Nejbližší bod levému hornímu rohu grafu	$\min((1 - se)^2 + r * (1 - sp)^2)$

kde: $r = \frac{1 - prevalence}{cost * prevalence}$ $prevalence = \frac{n_{cases}}{n_{cases} + n_{controls}}$

$cost$ – penalizace falešně negativních výsledků

defaultně: $prevalence = 0{,}5$ a $cost = 1$

Hledání cut-off – doplnění II



Sens	Spec	Sens+ Spec	closest. topleft	Sens* Spec
1.000	0.000	1.000	1.000	0.000
0.933	0.115	1.049	0.787	0.108
0.883	0.346	1.229	0.441	0.306
0.783	0.538	1.322	0.260	0.422
0.750	0.615	1.365	0.210	0.462
0.567	0.808	1.374	0.225	0.458
0.467	0.923	1.390	0.290	0.431
0.350	1.000	1.350	0.423	0.350
0.217	1.000	1.217	0.614	0.217
0.150	1.000	1.150	0.723	0.150
0.050	1.000	1.050	0.903	0.050
0.033	1.000	1.033	0.934	0.033
0.000	1.000	1.000	1.000	0.000

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“