Analisis ROC

Walter Sosa-Escudero

Universisad de San Andrés y CONICET

Recordar

$$Y_i \sim \{0,1\}, \;\; \hat{Y}_i \sim \{0,1\}$$

Matriz de confusion:

		Y_i	
		0	1
$\hat{Y}_i$	0	vn$_i$	fn$_i$
	1	fp$_i$	vp$_i$

vn = verdadero negativo, fp = falso positivo, fn = falso negativo, vp = verdadero positivo.

Intuiciones

- Clasificador de Bayes: perdida *simetrica*.
- Variando el umbral $p_i > c$ (asimetria), mas/menos predicciones positivas, altera los errores (fp y fn).
- Trade-off: reducir un error aumenta el otro.
- Curva ROC: representacion del trade-off.
- Permite: a) medir la capacidad predictiva de un esquema de clasificacion, b) comparar esquemas de clasificacion.

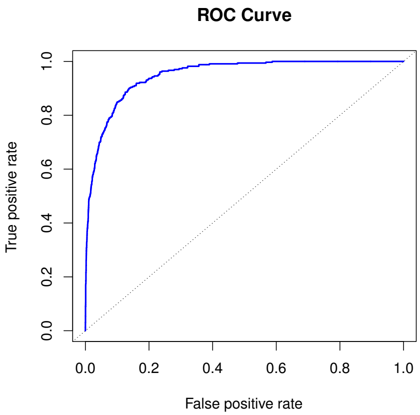
Definiciones

- $P = \sum Y_i =$ positivos
- $N = \sum (1 - Y_i) =$ negativos
- $T = P + N =$ todos
- vp $= \sum \hat{Y}_i Y_i$
- fp $= \sum \hat{Y}_i (1 - Y_i)$
- tvp $=$ vp$/P$
- tfp $=$ fp$/N$

Curva ROC

- Clasificador binario: $\hat{Y}_i = 1\,[p_i > c]$, $c \in [0,1]$
- Bayes: $c = 0{,}5$ (simetria)
- Idealmente tvp $= 1$ y tfp $= 0$
- Asimetria? $c \neq 0{,}5$.
- $c = 1$, todos clasificados negativos, tvp $= 0$, tfp $= 0$.
- $c = 0$, todos clasificados positivos, tvp $= 1$, tfp $= 1$

Curva ROC: (tfp, tvp) para todos los valores posibles de $c \in [0,1]$.



Fuente: James, Witten, Hastie y Tibshirani, 2013, *An Introduction to Statistical Learning*, Wiley, New York.

Resultado: ROC tiene pendiente positiva

En $(0,0)$, $c=1$. Cuando c cae, vp_i aumenta y fp_i aumenta. Entonces

$$\text{tvp} = \frac{\sum \hat{Y}_i Y_i}{P} \text{ y } \text{tfp} = \frac{\sum \hat{Y}_i (1-Y_i)}{T-P}$$

tambien aumentan cuando c cae.

La curva ROC, formalmente

Es facil mostrar que:

$$\text{tvp} = \frac{\sum \hat{Y}_i}{P} - \frac{T-P}{P}\ \text{tfp}$$

ROC es el 'locus' de todos los puntos sobre esta curva, para todos los valores de $c \in [0,1]$. Mas concretamente,

$$\text{tvp}(c) = \frac{\sum \hat{Y}_i(c)}{P} - \frac{T-P}{P}\ \text{tfp(c)}, \qquad c \in [0,1]$$

Pendiente positiva: cuando c cae, $\sum \hat{Y}_i/P$ aumenta mas que lo que $(T-P)/P$ tfp cae (Por que?)

El clasificador invertido

Punto: la curva ROC en general esta por arriba de la recta de 45^o (tfp = tvp).

$$\hat{Y}_i^F \equiv 1 - \hat{Y}_i$$

Recordar

$$\text{tvp} = \frac{\sum \hat{Y}_i Y_i}{P}, \qquad \text{tfp} = \frac{\sum \hat{Y}_i (1 - Y_i)}{T - P}$$

Calculemos tvp y tfp para el clasificador invertido:

$$\text{tvp}^F = \frac{\sum (1 - \hat{Y}_i) Y_i}{P}, \qquad \text{tfp}^F = \frac{\sum (1 - \hat{Y}_i)(1 - Y_i)}{T - P}$$

Resultado: $\text{tfp} - \text{tvp} = \text{tvp}^F - \text{tfp}^F$

Resultado: si es posible apelar al clasificador invertido, la curva ROC esta siempre por encima de la recta de 45^o.

Del resultado anterior: $\text{tfp} - \text{tvp} = \text{tvp}^F - \text{tfp}^F$

Si ROC esta por debajo de la recta de 45^o, entonces $\text{tfp} > \text{tvp}$. Por la igualdad anterior, el clasificador invertido esta *por encima*.

Usos de ROC

- Curva ROC ideal?
- AROC: area under ROC (suerte de R^2)
- Herramienta para comparar clasificadores
- Clasificadores dominados
- Eleccion de c?: Fijar un maximo tolerable para tfp.

Jerga

- Sensibilidad: tvp
- Razon de falsos positivos: tfp
- Exactitud: $(\text{vp} + \text{vn})/T$
- Especificidad: vn/N
- Valor predictivo positivo: $\text{vp}/(\text{vp} + \text{fp})$
- Valor predictivo negativo: $\text{vn}/(\text{vn} + \text{fn})$

Ver 'Receiver operating characteristic' en Wikipedia