CURSO DATA SCIENCE – COMISIÓN 39960

Proyecto Final: Entrenamiento y optimización de modelos de Machine Learning para la detección precoz de tumores mamarios

26 de agosto de 2023

Catalina Miranda y Basilia Alvarado

TABLA DE CONTENIDO

ABSTRACT

El cáncer de mama es el tipo de cáncer más frecuente en las mujeres. Solamente en 2020, en el mundo, se diagnosticaron más de 2,2 millones de casos y alrededor de 685 mil personas fallecieron como consecuencia de dicha enfermedad. Sin embargo, los enfermos no se distribuyen de manera uniforme a nivel global, sino que la mayoría de los casos y de los decesos se registran en países de ingresos bajos y medianos. La supervivencia al cáncer de mama a cinco años excede al 90% en los países del primer mundo, mientras que en los países emergentes se registran valores inferiores al 50%. La mejora en la calidad de vida de los países ricos se debe principalmente a la combinación de técnicas de detección precoz y de terapias eficaces basadas en cirugía, radioterapia y fármacos.

Entre las técnicas de detección precoz menos invasivas se encuentra la biopsia por aspiración con aguja fina (FNA), que permite obtener una serie de imágenes del tumor para determinar la necesidad de aplicar terapias o descartar la presencia de la enfermedad. En el presente proyecto se aplicarán modelos de Machine Learning para clasificar en "benignos" o "malignos" a los resultados del estudio de FNA. De esta manera, el análisis a realizar será predictivo.

El modelo se realizará a partir de los atributos de los tumores observados en las imágenes. Cada uno de los atributos describe una característica del núcleo de las células obtenidas luego de la realización del estudio. Los resultados del proyecto permitirán detectar tumores malignos que requieran de tratamientos posteriores de forma rápida y efectiva sin necesidad de realizar intervenciones quirúrgicas complejas. Se aplicarán modelos de aprendizaje supervisado, como Random Forest Classifier (RFC) y Support Vector Machine (SVM) y de aprendizaje no supervisado, como principal Component análisis (PCA).

La pregunta por responder será: ¿el tumor que posee el paciente es benigno o maligno?

PROBLEMA Y CONTEXTO COMERCIAL

La detección temprana del cáncer de mama es uno de los principales objetivos de todas las instituciones médicas del mundo. La aplicación de modelos predictivos para identificar y clasificar tumores permite aumentar la efectividad del diagnóstico, a la vez que minimiza la complejidad de los estudios necesarios para realizarlo. Los resultados del proyecto serán de interés para médicos, hospitales y clínicas de todo el mundo que quieran mejorar la calidad de sus diagnósticos.

ANALISIS EXPLORATORIO DE DATOS (EDA)

En esta sección se realizará el análisis exploratorio de datos, conocido por sus siglas en inglés como EDA. Este proceso tiene como objetivo examinar la base de datos seleccionada para encontrar patrones, descubrir anomalías y probar hipótesis usando medidas estadísticas.

A la hora de llevar a cabo el EDA, se siguieron los siguientes pasos recomendados por el libro *"Hands-on exploratory data analysis with Python"* de Suresh Kumar Mukhiya y Usman Ahmed.

1. Definición del problema;
2. Recolección de datos;
3. Carga de datos en el formato deseado;
4. Procesamiento de datos;
5. Limpieza de datos;
6. Análisis de datos. Es el EDA propiamente dicho, que incluye la aplicación de conceptos de estadística descriptiva para conocer más a fondo los datos.

A continuación, se detallarán cada una de las etapas mencionadas previamente.

1. DEFINICIÓN DEL PROBLEMA

A partir de los atributos con los cuales se cuenta, será necesario identificar aquellos de mayor importancia en la identificación de tumores malignos. Se usará un modelo supervisado de clasificación.

2. RECOLECCIÓN DE DATOS

El conjunto de datos está formado por un archivo llamado "datos" que contiene 12 columnas, de las cuales 2 son variables de tipo categórico. A continuación, se enumeran los campos del archivo:

1. ID: identificador de la muestra extraída al paciente
2. Diagnóstico: resultado del análisis. Solo toma dos valores: maligno o benigno.
3. Radio: de la muestra extraída
4. Textura: de la muestra extraída
5. Perímetro: de la muestra extraída
6. Área: de la muestra extraída
7. Suavidad: de la muestra extraída
8. Compactibilidad: de la muestra extraída
9. Concavidad: de la muestra extraída

10. Puntos cóncavos: de la muestra extraída
11. Simetría: de la muestra extraída
12. Dimensión fractal: de la muestra extraída

Los atributos 3 – 12 son los resultantes de analizar las imágenes obtenidas en el estudio.

Link de descarga del conjunto de datos seleccionado:

https://archive.ics.uci.edu/dataset/17/breast+cancer+wisconsin+diagnostic

3. OBTENCIÓN DE DATOS EN PYTHON

El archivo fue cargado en Google Colab como un Pandas Dataframe, a partir de la clonación de una carpeta de GitHub con la base de datos seleccionada.

4. PROCESAMIENTO DE DATOS

Incluye las etapas de estructuración y ordenamiento de los datos para que su posterior análisis sea más sencillo. Dado que se cuenta únicamente con un DataFrame, no fue necesario realizar ninguna reestructuración de los datos. Las variables cuantitativas están todas en milímetros.

Tabla 1. DataFrame

Columna	Tipo de variable	Tipo de dato	Descripción
ID	Cualitativa	int64	Es la identificación de cada muestra obtenida.
Diagnóstico	Cualitativa	string	Es la clasificación del tumor (benigno o maligno).
Radio	Cuantitativa	float64	Radio de la muestra, calculado como la media de las distancias del centro del tumor a los puntos del perímetro.
Textura	Cuantitativa	float64	Textura de la muestra, considerada como la desviación estándar del color con respecto a una escala de grises.
Perímetro	Cuantitativa	float64	Perímetro de la muestra.
Área	Cuantitativa	float64	Área de la muestra.
Suavidad	Cuantitativa	float64	Se considera como la variación local del radio.
Compactibilidad	Cuantitativa	float64	Es el perímetro al cuadrado, dividido el área menos 1.
Concavidad	Cuantitativa	float64	Es la severidad de las porciones cóncavas del contorno de la muestra.
Puntos cóncavos	Cuantitativa	float64	Es la cantidad de porciones cóncavas del contorno de la muestra.
Simetría	Cuantitativa	float64	Simetría de la muestra
Dimensión fractal	Cuantitativa	float64	Exponente que da cuenta de cuán completamente parece llenar un fractal el espacio conforme se amplía el primero hacia escalas más y más finas

Para cada uno de los atributos cuantitativos de la tabla se toma el valor medio, la desviación estándar (identificada como *se*) y el peor valor registrado.

Las variables compactibilidad, concavidad, puntos_cóncavos y simetría se toman en una escala que varía entre 0 y 1, siendo cero nada y 1 todo. Por ejemplo, 0 simetría significa que es totalmente asimétrico, mientras que 1 de simetría indica que es totalmente simétrico.

5. LIMPIEZA DE DATOS

Consiste en la eliminación de *outliers* y en el tratamiento de datos ausentes.

DATOS AUSENTES

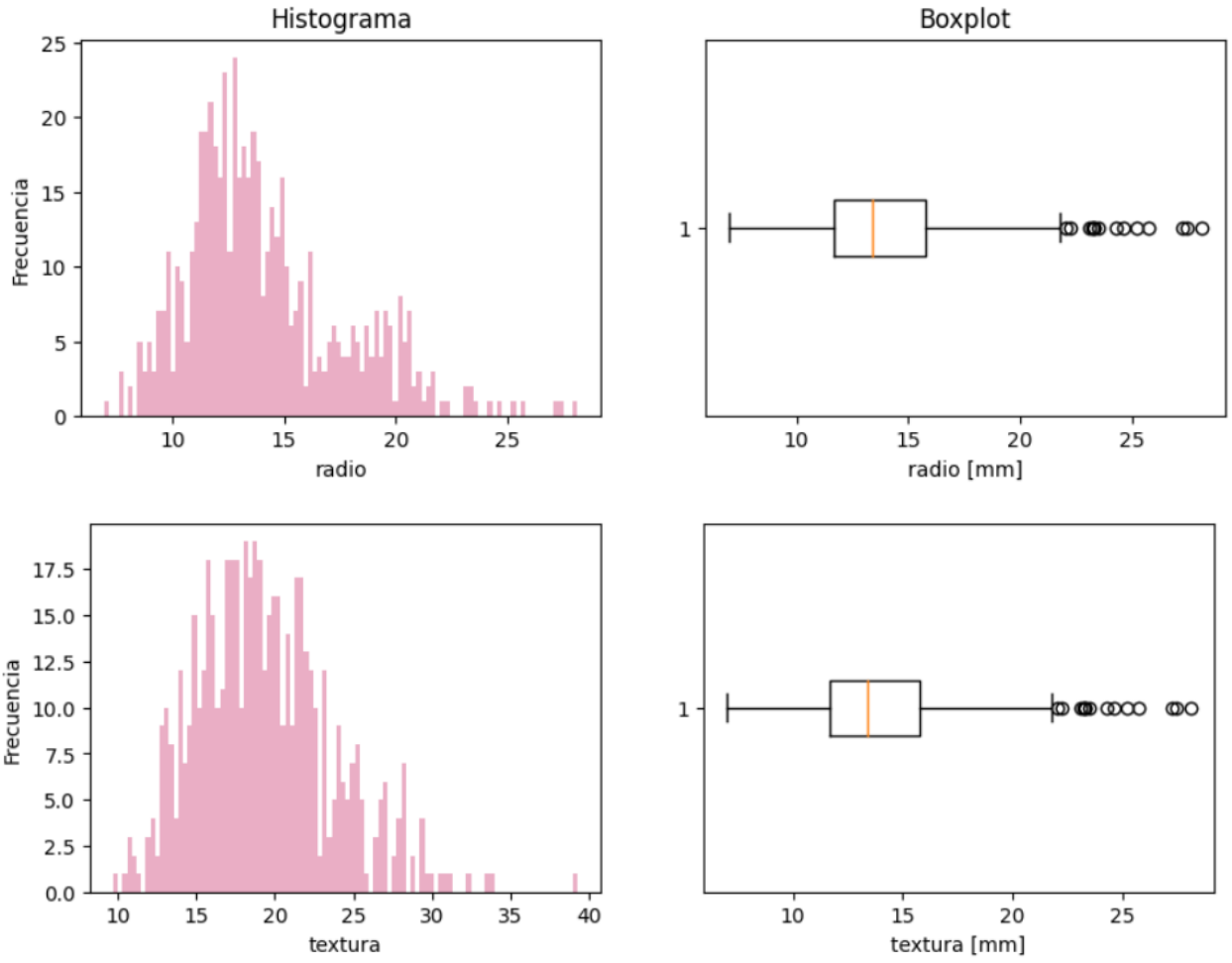
```
<class 'pandas.core.frame.DataFrame'>
RangeIndex: 569 entries, 0 to 568
Data columns (total 32 columns):
 #   Column                   Non-Null Count  Dtype
---  ------                   --------------  -----
 0   diagnóstico              569 non-null    int64
 1   radio medio              569 non-null    float64
 2   textura media            569 non-null    float64
 3   perímetro medio          569 non-null    float64
 4   área media               569 non-null    float64
 5   suavidad media           569 non-null    float64
 6   compactibilidad media    569 non-null    float64
 7   concavidad media         569 non-null    float64
 8   puntos_cóncavos medios   569 non-null    float64
 9   simetría media           569 non-null    float64
 10  dimensión_fractal media  569 non-null    float64
 11  radio se                 569 non-null    float64
 12  textura se               569 non-null    float64
 13  perímetro se             569 non-null    float64
 14  área se                  569 non-null    float64
 15  suavidad se              569 non-null    float64
 16  compactibilidad se       569 non-null    float64
 17  concavidad se            569 non-null    float64
 18  puntos_cóncavos se       569 non-null    float64
 19  simetría se              569 non-null    float64
 20  dimensión_fractal se     569 non-null    float64
 21  peor radio               569 non-null    float64
 22  peor textura             569 non-null    float64
 23  peor perímetro           569 non-null    float64
 24  peor área                569 non-null    float64
 25  peor suavidad            569 non-null    float64
 26  peor compactibilidad     569 non-null    float64
 27  peor concavidad          569 non-null    float64
 28  peores puntos_cóncavos   569 non-null    float64
 29  peor simetría            569 non-null    float64
 30  peor dimensión_fractal   569 non-null    float64
 31  Unnamed: 32              0 non-null      float64
```

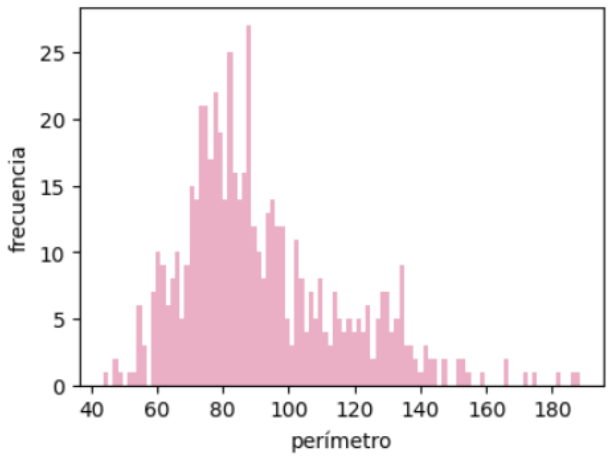
Figura 1. Análisis de valores ausentes

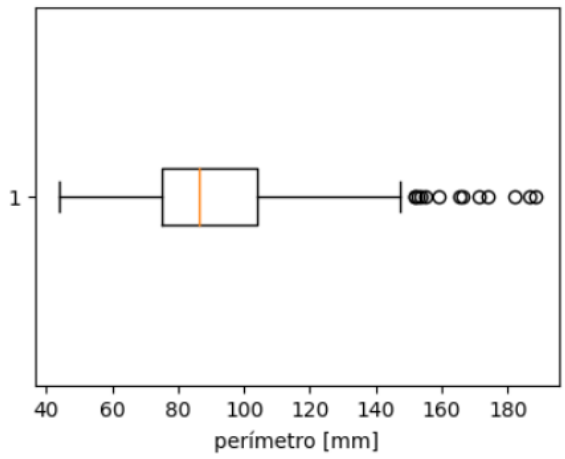
Tal como se observa en la figura 1, ninguna de las variables tiene valores ausentes.

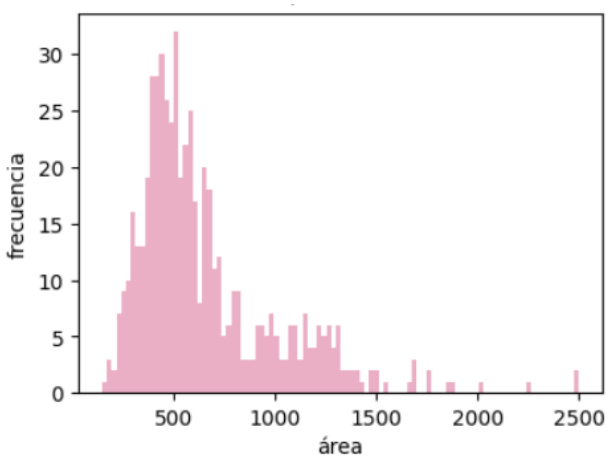
OUTLIERS

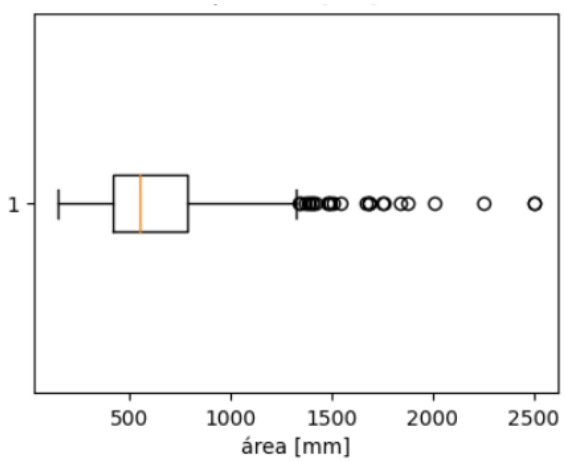
Las variables presentan todas distribuciones similares. No podrían considerarse distribuciones normales, ya que se observa un ligero sesgo hacia la izquierda, y en algunos casos un leve pico secundario. Se comprueba que la moda es menor que la mediana y que la media. Por el momento no se tratarán a los valores alejados de la media como outliers. Se esperará a ver qué se observa durante el análisis univariado tomando como tercera variable el tipo de tumor.

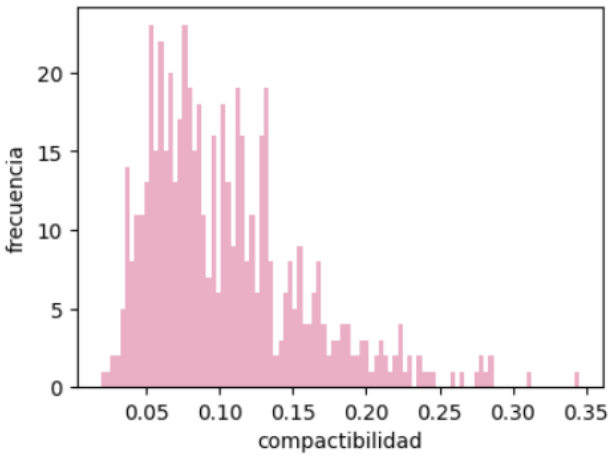


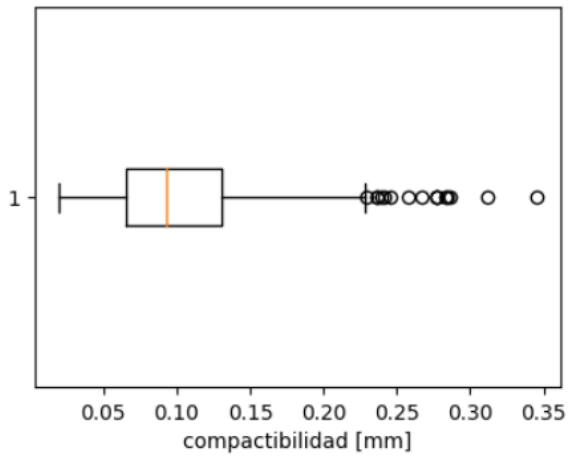

frecuencia
perímetro

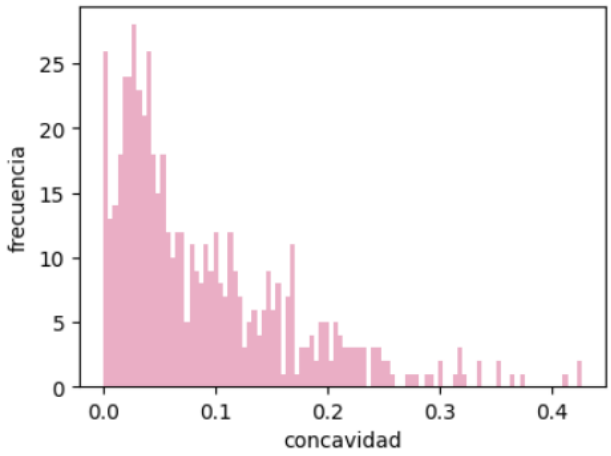

perímetro [mm]

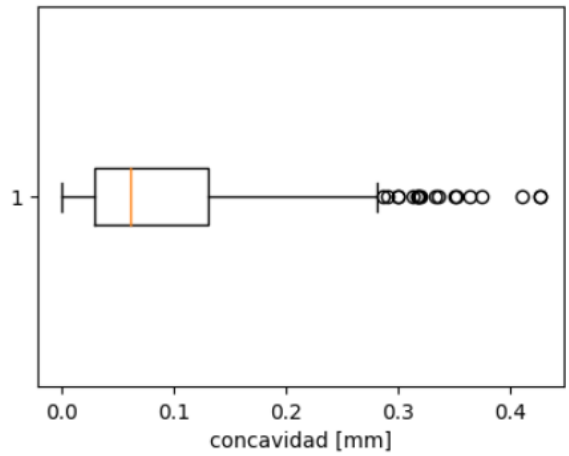

frecuencia
área

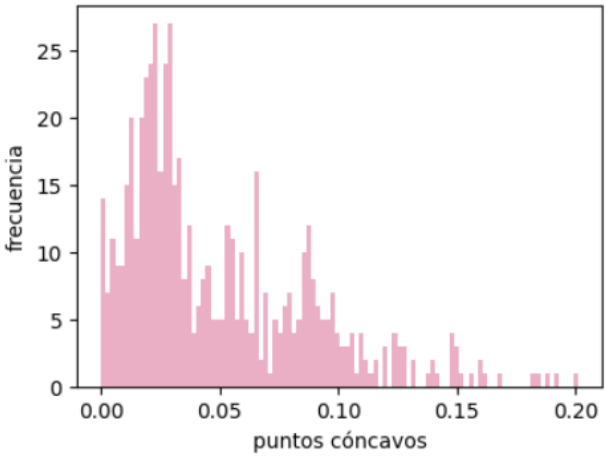

área [mm]

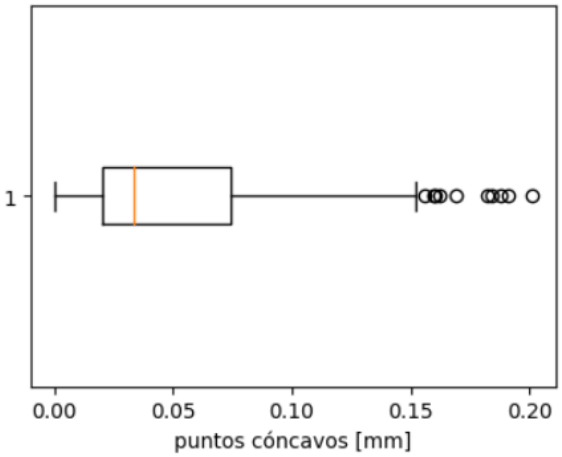

frecuencia
compactibilidad

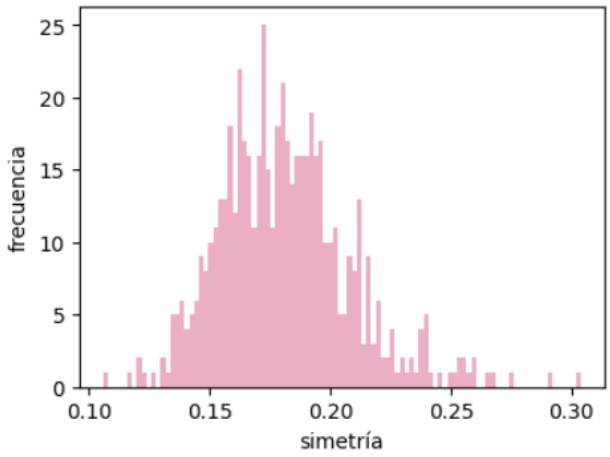

compactibilidad [mm]

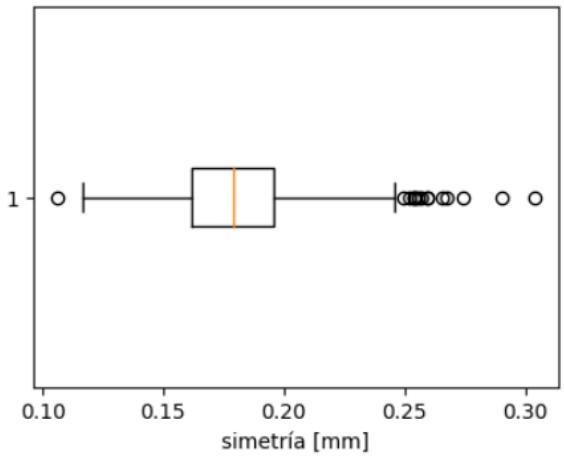

frecuencia
concavidad


1
concavidad [mm]


frecuencia
puntos cóncavos


1
puntos cóncavos [mm]


frecuencia
simetría


1
simetría [mm]

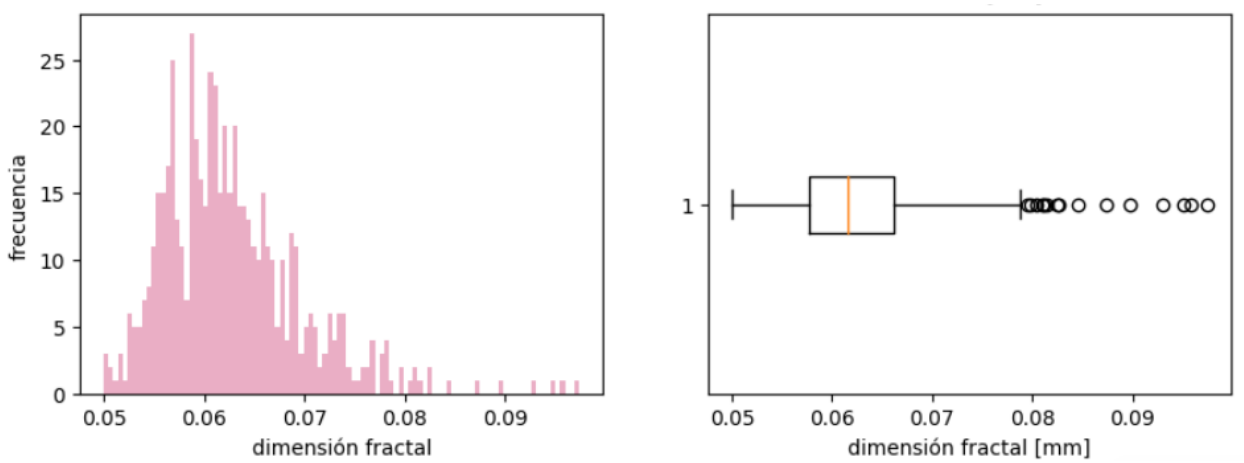


Figura 2. Histogramas y boxplots de las variables cuantitativas del set de datos.

	diagnóstico	radio	textura	perímetro	área	suavidad	compactibilidad	concavidad	puntos_cóncavos	simetría	dimensión_fractal
count	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000	569.000000
mean	0.372583	14.127292	19.289649	91.969033	654.889104	0.096360	0.104341	0.088799	0.048919	0.181162	0.062798
std	0.483918	3.524049	4.301036	24.298981	351.914129	0.014064	0.052813	0.079720	0.038803	0.027414	0.007060
min	0.000000	6.981000	9.710000	43.790000	143.500000	0.052630	0.019380	0.000000	0.000000	0.106000	0.049960
25%	0.000000	11.700000	16.170000	75.170000	420.300000	0.086370	0.064920	0.029560	0.020310	0.161900	0.057700
50%	0.000000	13.370000	18.840000	86.240000	551.100000	0.095870	0.092630	0.061540	0.033500	0.179200	0.061540
75%	1.000000	15.780000	21.800000	104.100000	782.700000	0.105300	0.130400	0.130700	0.074000	0.195700	0.066120
max	1.000000	28.110000	39.280000	188.500000	2501.000000	0.163400	0.345400	0.426800	0.201200	0.304000	0.097440

Figura 3. Resumen de las características estadísticas de los datos.

6. ANÁLISIS DE DATOS

En primer lugar, se realizó un recuento de los tumores analizados, siendo 0 benigno y 1 maligno.

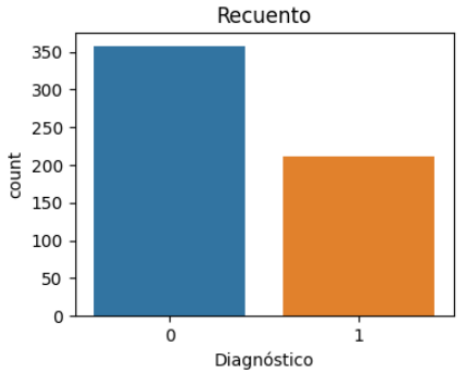
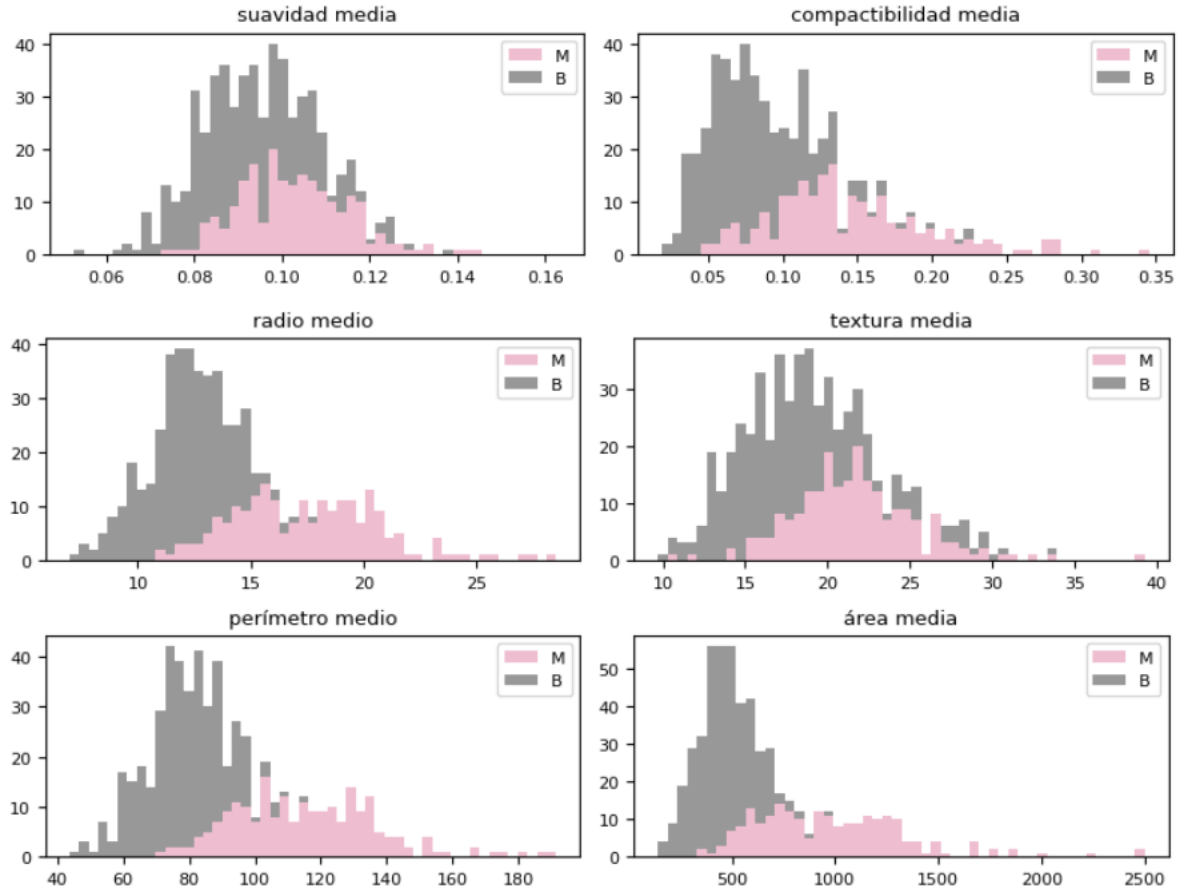


Figura 4. Recuento de tumores malignos y benignos

ANÁLISIS UNIVARIADO

Para conocer la relación entre las variables cuantitativas y el diagnóstico del tumor se realizaron histogramas en función de si el tumor es benigno o maligno. El análisis de la distribución tomando como tercera variable al diagnóstico muestra que fue una decisión acertada no eliminar los datos que parecían outliers del análisis univariado, ya que cada pico observado corresponde a un tipo de tumor diferente.

Los valores medios de radio celular, perímetro, área, concavidad y puntos cóncavos pueden usarse en la clasificación del cáncer, ya que difieren en función del tipo de tumor. Los valores más grandes de estos parámetros tienden a mostrar una correlación con los tumores malignos. Por otro lado, los valores medios de textura, suavidad, simetría y dimensión fraccional no muestran una preferencia particular de un diagnóstico sobre el otro.



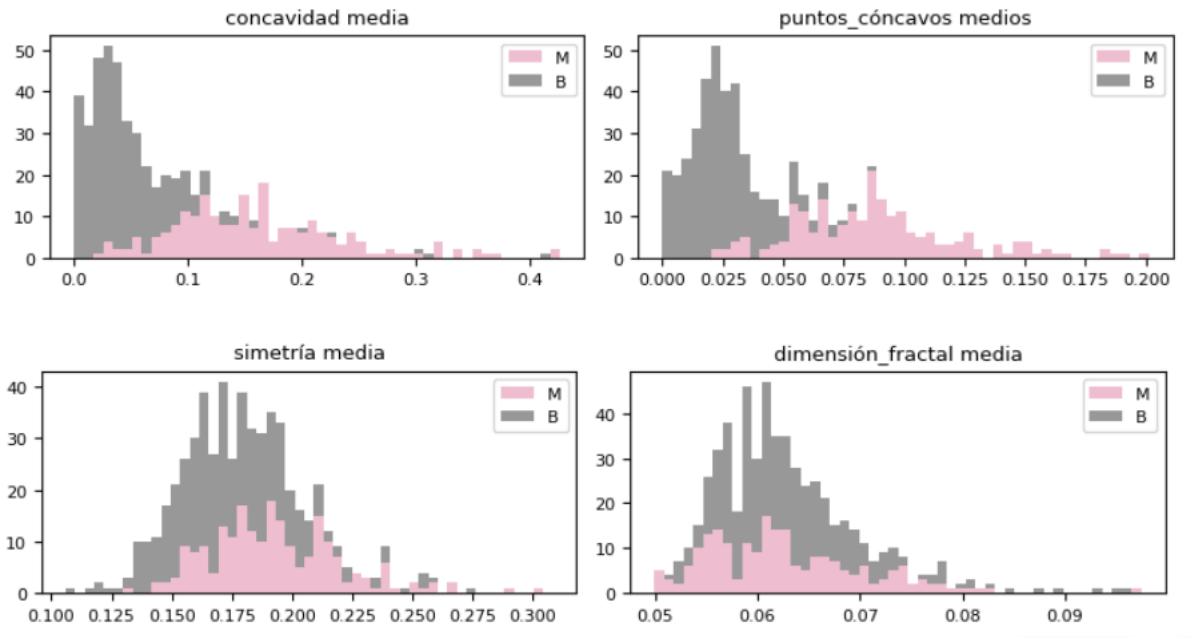


Figura 5. Histogramas teniendo en cuenta el tipo de tumor.

ANÁLISIS BIVARIADO

Por otro lado, se hicieron gráficos de violín, de enjambre y de caja para analizar la correlación entre los datos.

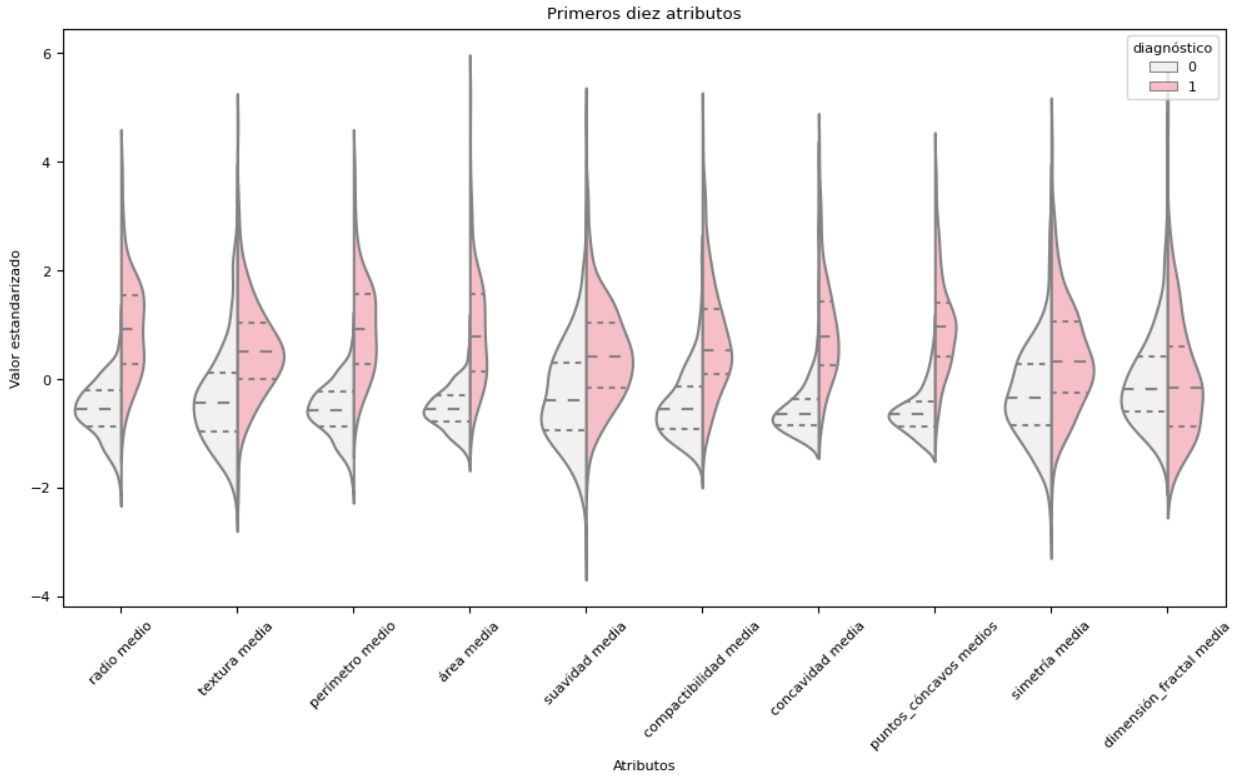


Figura 6. Análisis bivariado

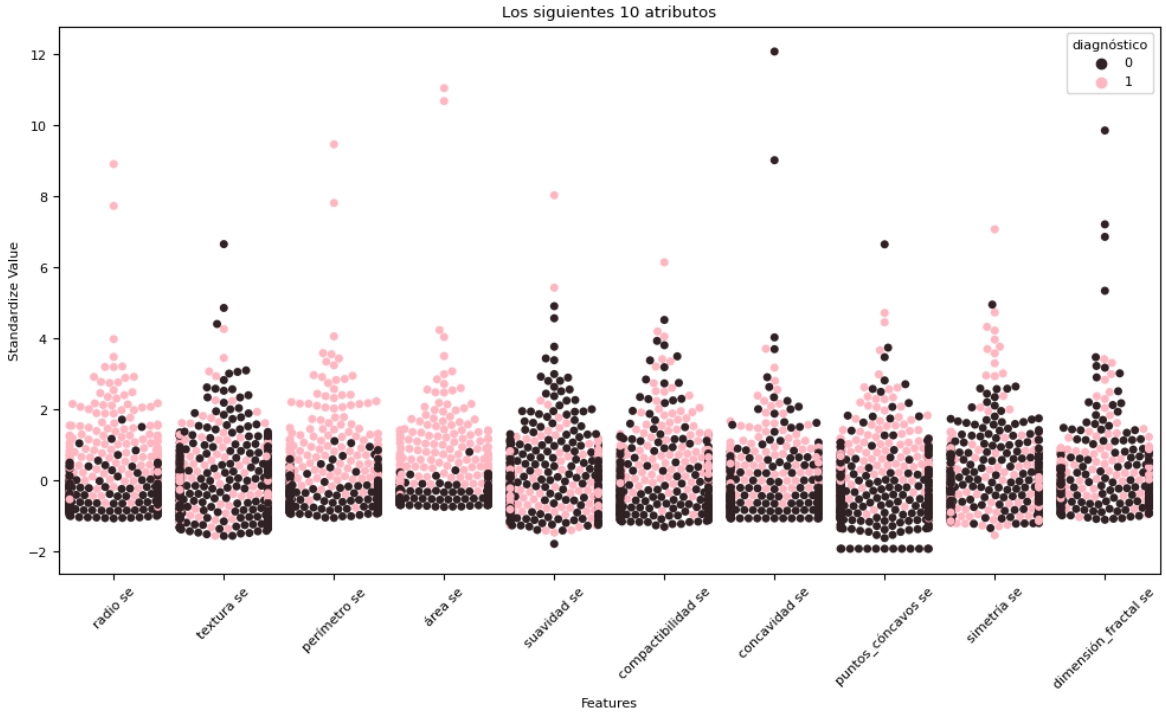


Figura 7. Análisis bivariado

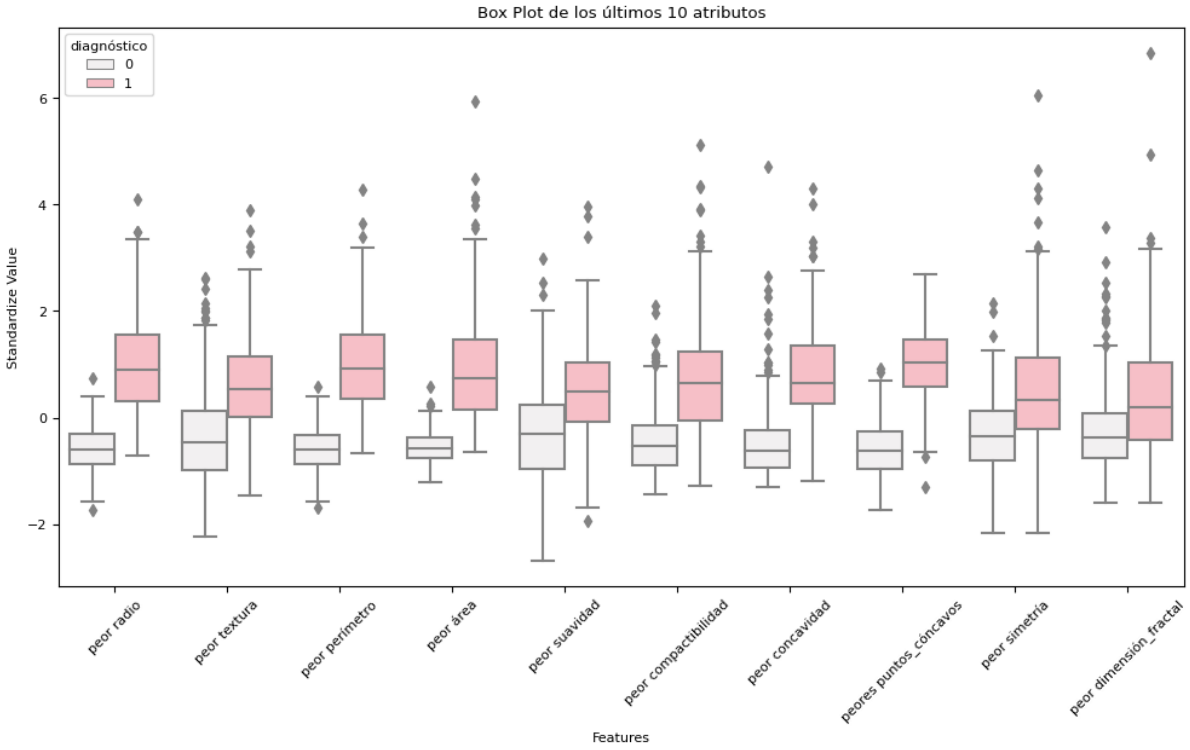


Figura 8. Análisis bivariado

El diagrama de violín es muy eficiente para comparar distribuciones de diferentes variables, ya que en él la clasificación se vuelve clara. Finalmente, los diagramas de caja son útiles para comparar la mediana y detectar valores atípicos.

ANÁLISIS MULTIVARIADO

En la figura 9 se observa un mapa de correlación, con una máscara que muestra solo aquellas correlaciones que son significativas, es decir, mayores a 0,8. A continuación, se exploran algunas de las relaciones identificadas como importantes.

Cabe destacar que todas las variables tienen correlación igual a uno consigo mismas.

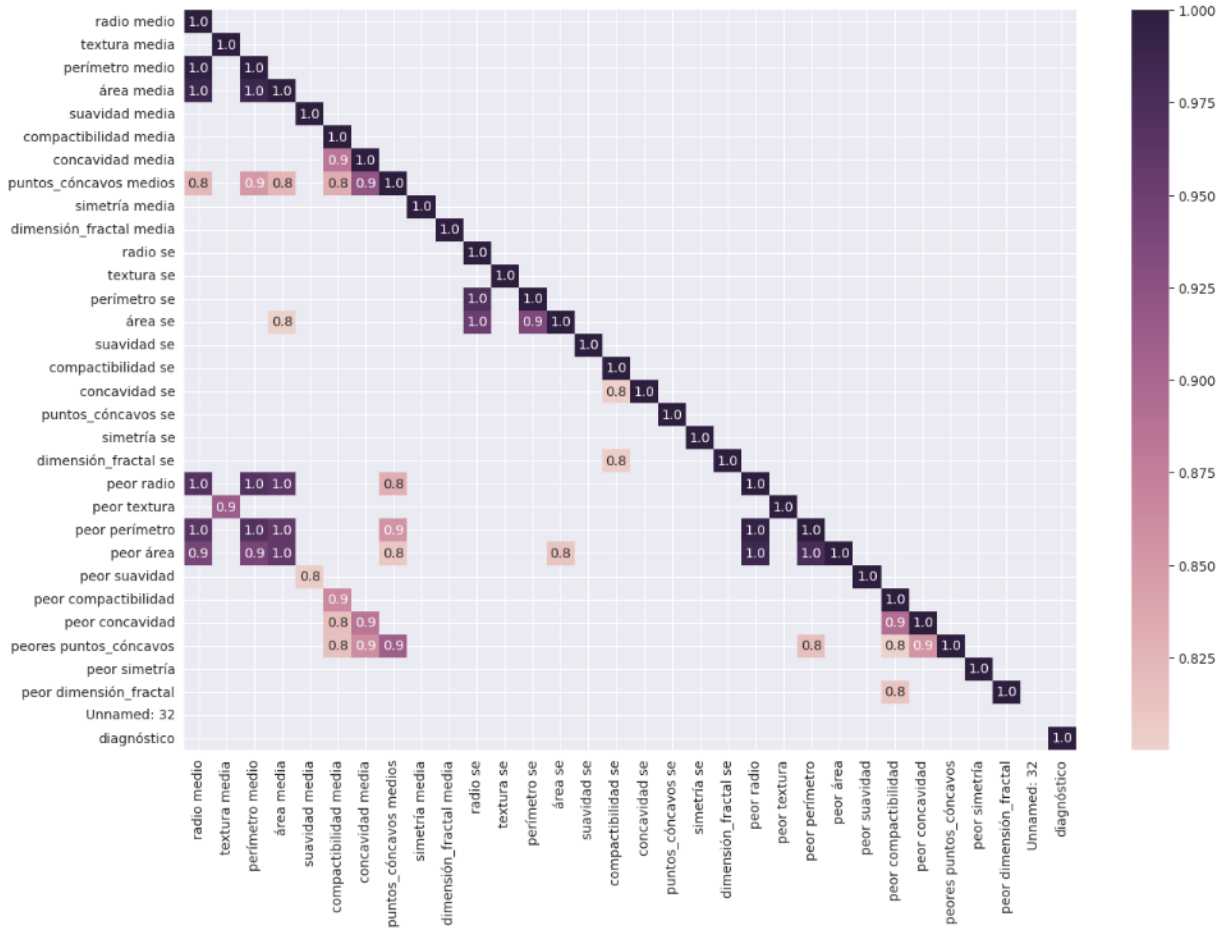


Figura 9. Correlación entre variables.

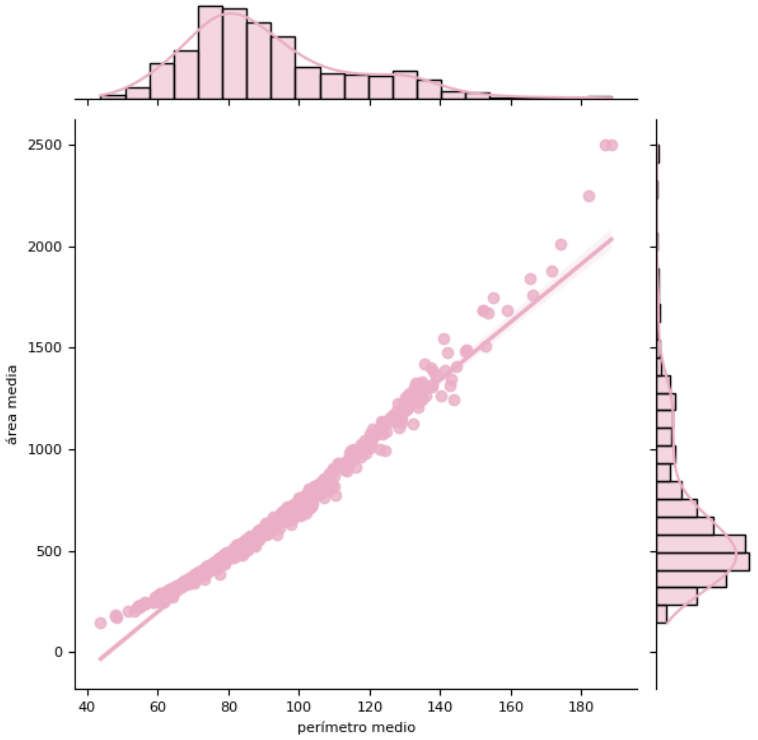


Figura 10. Correlación entre el perímetro y el área medios: 0,98.

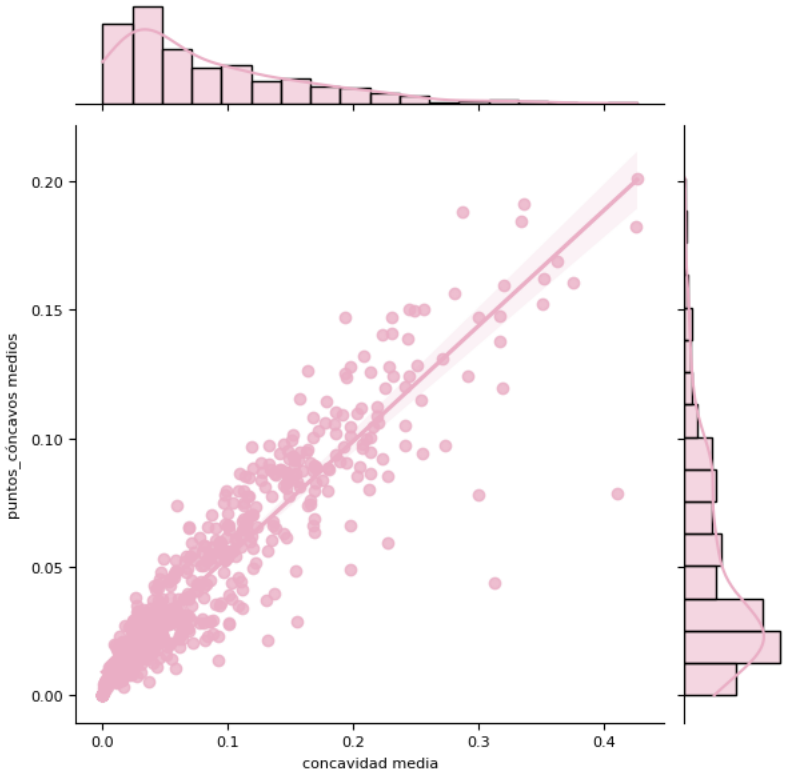


Figura 11. Correlación entre concavidad media y puntos cóncavos: 0,92.

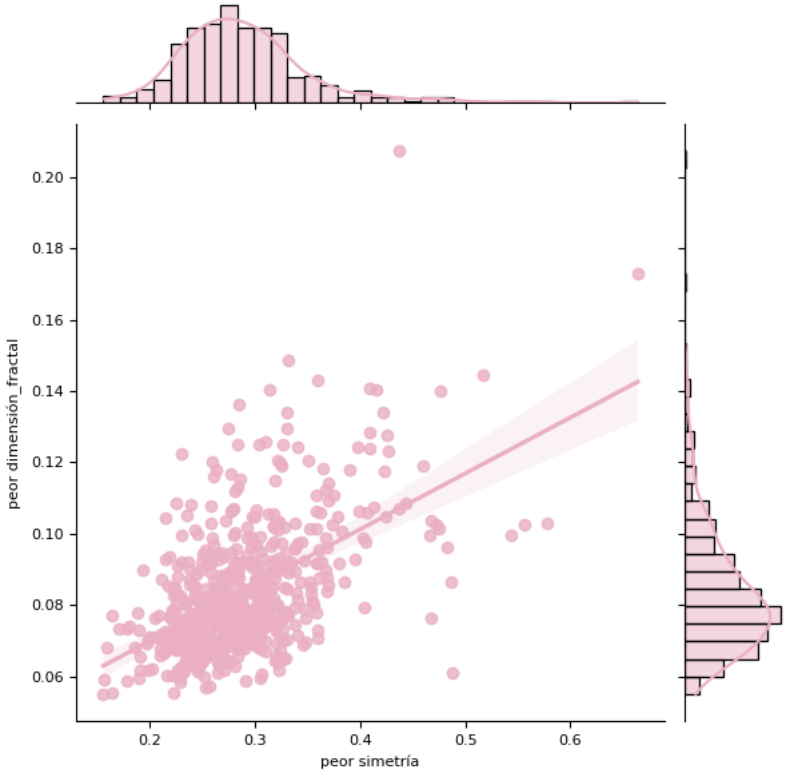


Figura 12. Correlación entre la peor simetría y dimensión fractal: 0,53.

De los todos los gráficos anteriores se pueden extraer algunas conclusiones:

- Las medianas de algunas características son muy diferentes entre "malignas" y "benignas". Esta separación se puede ver claramente en los diagramas de caja. Las siguientes pueden ser muy buenas características para el modelo de clasificación: radio medio, área media, puntos cóncavos medios, peor radio, peor perímetro, peor área, peores puntos cóncavos.
- Hay distribuciones que parecen similares entre "malignas" y "benignas". Por ejemplo: suavidad media, simetría media, dimensión fractal media, error de suavidad. Estas características son débiles en la clasificación de datos.
- Algunas características tienen distribuciones similares, por lo que pueden estar altamente correlacionadas entre sí. Por ejemplo: perímetro medio vs. área media, concavidad media vs. puntos cóncavos medios y peor simetría vs. peor dimensión fractal.

INGENIERÍA DE ATRIBUTOS

Se usó la selección de aributos univariados *(sklearn.feature_selection.SelectKBest*) para elegir las 5 funciones con las puntuaciones más altas. Se decidió usar 5 porque en el *heatmap* se ven alrededor de

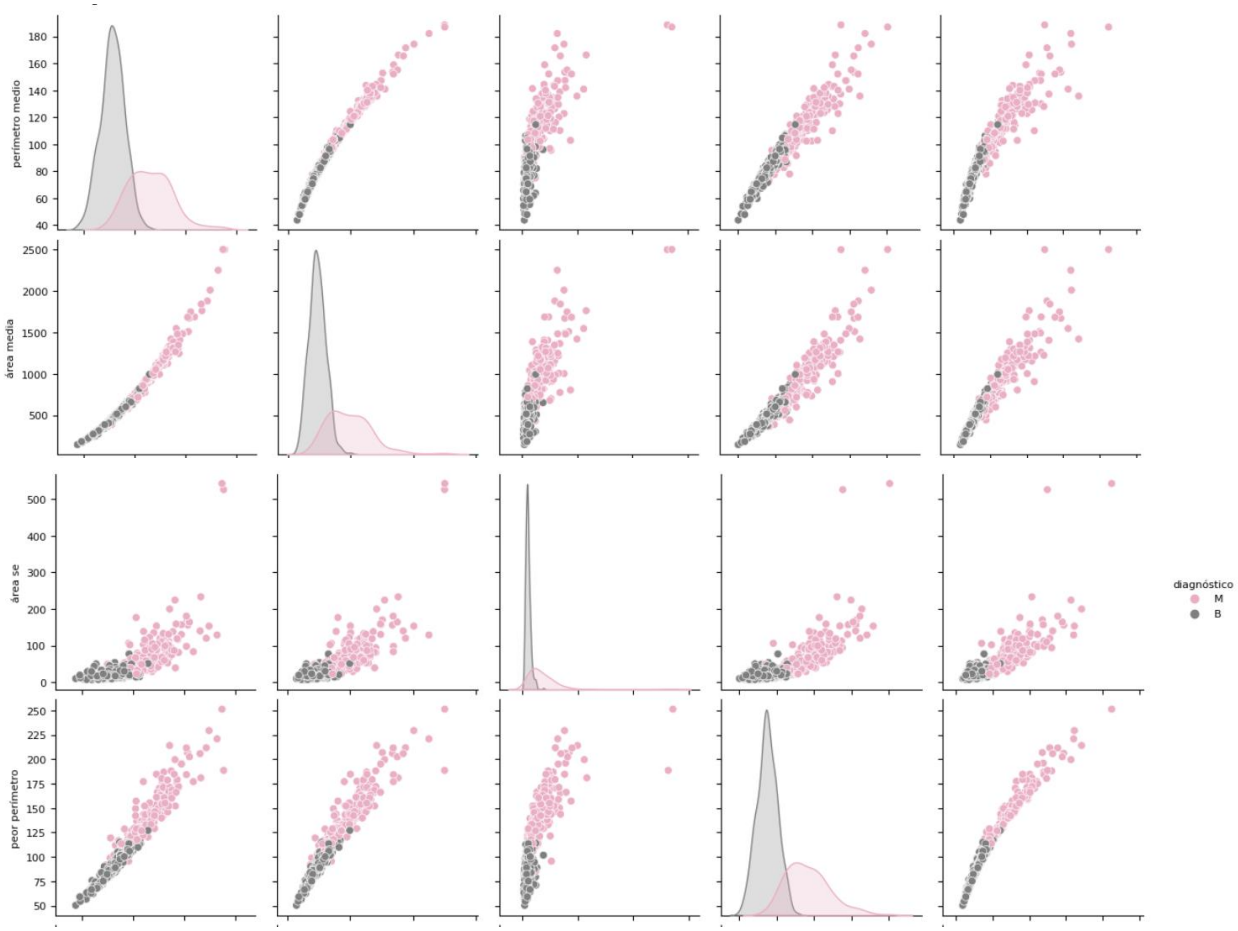
5 grupos de variables que están altamente correlacionadas. El código de la figura 13 arroja como mejores atributos al perímetro medio, el área media, el área se, el peor perímetro y la peor área.

```
from sklearn.feature_selection import SelectKBest, chi2
feature_selection = SelectKBest(chi2, k=5)
feature_selection.fit(data, y)
selected_features = data.columns[feature_selection.get_support()]
print("The five selected features are: ", list(selected_features))
```

Figura 13. Ingeniería de atributos con sklearn.

	perímetro medio	área media	área se	peor perímetro	peor área
0	122.80	1001.0	153.40	184.60	2019.0
1	132.90	1326.0	74.08	158.80	1956.0
2	130.00	1203.0	94.03	152.50	1709.0
3	77.58	386.1	27.23	98.87	567.7
4	135.10	1297.0	94.44	152.20	1575.0

Figura 14. Propiedades de los 5 mejores atributos.



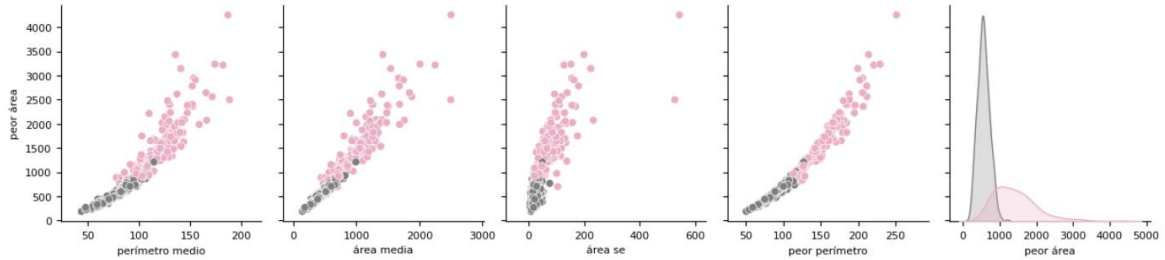


Figura 15. Relación de los 5 atributos con el tipo de tumor.

La figura 15 permite identificar claramente la diferencia entre las características de los tumores benignos y malignos. La mayoría de los tumores malignos toman valores mayores de todas las variables, es decir, tienen mayores perímetros y áreas.

IMPLEMENTACIÓN DE MODELOS

Random forest classifier

Usando el código de la figura 17 se obtuvieron los resultados de la figura 18.

```
from sklearn.ensemble import RandomForestClassifier
rfc = RandomForestClassifier(n_estimators=200)
rfc.fit(X_train, y_train)
y_pred = rfc.predict(X_test)
```

Figura 16. Modelo random forest classifier.

```
Matriz de confusión:
 [[118   3]
 [  2  65]]


Reporte:
              precision    recall  f1-score   support

           0       0.98      0.98      0.98       121
           1       0.96      0.97      0.96        67

    accuracy                           0.97       188
   macro avg       0.97      0.97      0.97       188
weighted avg       0.97      0.97      0.97       188
```

Figura 17. Evaluación del modelo.

Como puede observarse, la tasa de precisión es aproximadamente del 97%. El modelo solo hace 5 predicciones incorrectas de 188. Las características elegidas son bastante buenas para identificar tumores cancerígenos.

Principal component análisis (PCA) y Support vector machine (SVM)

El análisis de componentes principales realiza una reducción de dimensionalidad lineal utilizando la descomposición de valores singulares de los datos para proyectarlos a un espacio dimensional inferior. De esta manera, transforma los datos en características que explican la mayor variación de datos. Para un mejor rendimiento de PCA, es recomendable primero escalar los datos para que cada característica tenga una variación de una sola unidad.

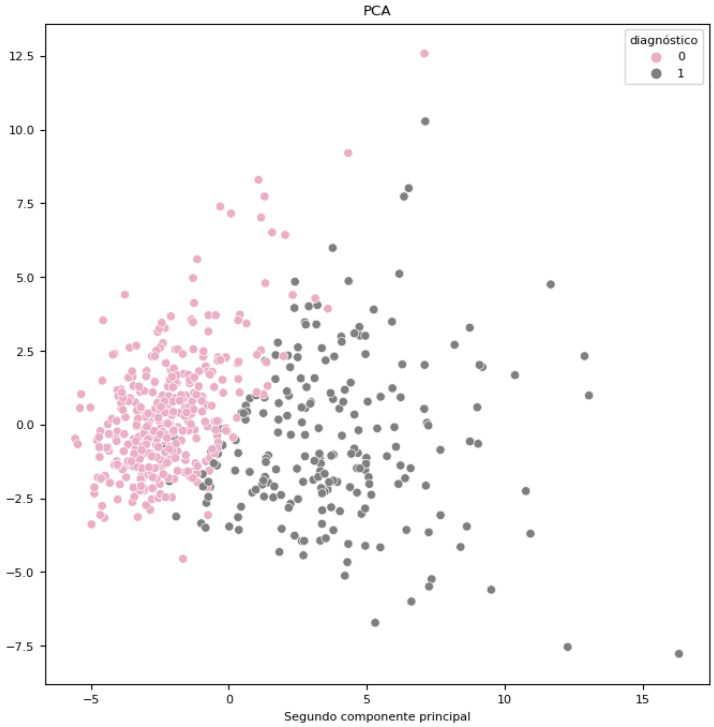


Figura 18. Reducción de la dimensionalidad con PCA.

Luego de la reducción de la dimensionalidad, se aplicó un modelo de SVM con los siguientes resultados:

```
Matriz de confusión:
 [[116   5]
 [  5  62]]


Reporte:
              precision    recall  f1-score   support

           0       0.96      0.96      0.96       121
           1       0.93      0.93      0.93        67

    accuracy                           0.95       188
   macro avg       0.94      0.94      0.94       188
weighted avg       0.95      0.95      0.95       188
```

Figura 19. Evaluación del modelo SVM

En este modelo la precisión es del 95%, levemente menor a la del modelo anterior. Sin embargo, gracias al algoritmo PCA se pudo reducir la cantidad de dimensiones en los datos.

CONCLUSIÓN

En la primera parte de este proyecto se realizó un análisis exploratorio de datos para comprender cada una de las 30 variables originales y cómo podrían utilizarse para identificar tumores malignos. Se encontró que las medianas de algunas de ellas eran muy diferentes entre tumores malignos y benignos. Además, se encontraron correlaciones entre el perímetro y el área medios, y la concavidad media y los puntos cóncavos medios.

Utilizando la selección de aributos univariados del módulo sklearn *(sklearn.feature_selection.SelectKBest*) se eligieron las 5 características con las puntuaciones más altas, es decir, con mayor potencial para realizar un análisis predictivo. Los 5 atributos resultantes fueron el perímetro medio, el área media, el área se, el peor perímetro y la peor área.

A continuación, se aplicó el modelo de random forest classfier con una precisión del 97%. Por otro lado, se utilizó PCA para encontrar los dos componentes principales y separar claramente los datos en benignos y malignos. Finalmente, se aplicó SVM para predecir la presencia de la enfermedad basado en PCA. La precisión de este modelo fue del 95%. Ambos modelos son útiles para la clasificación de tumores.