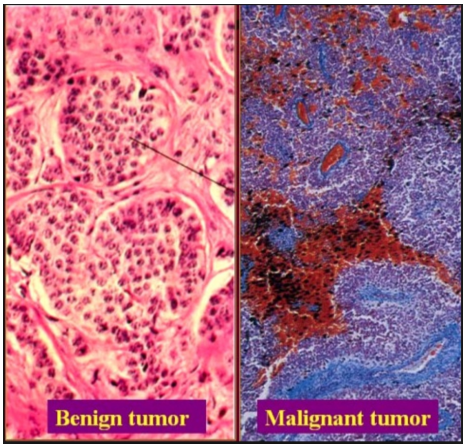
Metoda najmniejszych kwadratów

Zadanie 1.



Celem zadania jest zastosowanie metody najmniejszych kwadratów do predykcji, czy nowotwór jest złośliwy (ang. *malignant*) czy łagodny (ang. *benign*). Nowotwory złośliwe i łagodne mają różne charakterystyki wzrostu. Istotne cechy to m. in. promień i tekstura. Charakterystyki te wyznaczane są poprzez diagnostykę obrazową i biopsje.
Do rozwiązania problemu wykorzystamy bibliotekę `pandas`, typ `DataFrame` oraz dwa zbiory danych:

- `breast-cancer-train.dat`
- `breast-cancer-validate.dat`.

Nazwy kolumn znajdują się w pliku `breast-cancer.labels`. Pierwsza kolumna to identyfikator pacjenta `patient ID`. Dla każdego pacjenta wartość w kolumnie `Malignant/Benign` wskazuje klasę, tj. czy jego nowotwór jest złośliwy czy łagodny. Pozostałe 30 kolumn zawiera cechy, tj. charakterystyki nowotworu.

(a) Otwórz zbiory `breast-cancer-train.dat` i `breast-cancer-validate.dat` używając funkcji `pd.io.parsers.read_csv` z biblioteki `pandas`.

(b) Stwórz histogram (z rozróżnieniem na typ nowotworu) i wykres wybranej kolumny danych przy pomocy funkcji `hist` oraz `plot`. W przypadku wy-

kresu posortuj wartości kolumny od najmniejszej do największej. Pamiętaj o podpisaniu osi i wykresów.

(c) Stwórz reprezentacje danych zawartych w obu zbiorach dla liniowej i kwadratowej metody najmniejszych kwadratów (łącznie 4 macierze). Dla reprezentacji kwadratowej użyj tylko podzbioru dostępnych danych, tj. danych z kolumn `radius (mean)`, `perimeter (mean)`, `area (mean)`, `symmetry (mean)`.

(d) Stwórz wektor b dla obu zbiorów (tablicę numpy 1D-array o rozmiarze identycznym jak rozmiar kolumny `Malignant/Benign` odpowiedniego zbioru danych). Elementy wektora b to 1 jeśli nowotwór jest złośliwy, -1 w przeciwnym wypadku. Funkcja `np.where` umożliwi zwięzłe zakodowanie wektora b.

(e) Znajdź wagi dla liniowej oraz kwadratowej reprezentacji najmniejszych kwadratów przy pomocy macierzy A zbudowanych na podstawie zbioru `breast-cancer-train.dat`. Potrzebny będzie także wektor b zbudowany na podstawie zbioru `breast-cancer-train.dat`.

Uwaga. Problem najmniejszych kwadratów rozwiąż, stosując równanie normalne. Rozwiązując równanie normalne należy użyć funkcji `np.linalg.solve`, unikając obliczania odwrotności macierzy funkcją `scipy.linalg.pinv`.

(f) Znajdź odrębny zbiór wag dla reprezentacji liniowej, używając funkcji `scipy.linalg.lstsq` (która stosuje rozkład SVD do rozwiązania problemu) oraz zbiór wag dla zregularyzowanej reprezentacji liniowej, rozwiązując równanie normalne oraz stosując $\lambda = 0.01$.

(g) Oblicz współczynniki uwarunkowania macierzy, $\mathrm{cond}(A^T A)$, dla liniowej i kwadratowej metody najmniejszych kwadratów, wyznaczone na zbiorze treningowym. Jaki wpływ ma współczynnik uwarunkowania na numeryczną interpretację wag?

(h) Sprawdź jak dobrze otrzymane wagi przewidują typ nowotworu (łagodny czy złośliwy). W tym celu pomnóż liniową reprezentację zbioru `breast-cancer-validate.dat` oraz wyliczony wektor wag dla reprezentacji liniowej. Następnie powtórz odpowiednie mnożenie dla reprezentacji kwadratowej. Zarówno dla reprezentacji liniowej jak i kwadratowej otrzymamy wektor p. Zakładamy, że jeśli $p[i] > 0$, to i-ta osoba (prawdopodobnie) ma nowotwór złośliwy. Jeśli $p[i] \leq 0$ to i-ta osoba (prawdopodobnie) ma nowotwór łagodny.

Porównaj wektory p dla reprezentacji liniowej i kwadratowej z wektorem b (użyj reguł $p[i] > 0$ oraz $p[i] \leq 0$).

Dla wszystkich reprezentacji oblicz macierz pomyłek (ang. *confusion matrix*) oraz dokładność metody:

$acc = \frac{TP+TN}{TP+TN+FP+FN}$, gdzie
TP – liczba przypadków prawdziwie dodatnich
TN – liczba przypadków prawdziwie ujemnych
FP – liczba przypadków fałszywie dodatnich

FN – liczba przypadków fałszywie ujemnych.
Przypadek fałszywie dodatni zachodzi, kiedy model przewiduje nowotwór złośliwy, gdy w rzeczywistości nowotwór był łagodny. Przypadek fałszywie ujemny zachodzi, kiedy model przewiduje nowotwór łagodny, gdy w rzeczywistości nowotwór był złośliwy.