BARTOSZ SOWUL, KATARZYNA SZMULEWICZ

Metody selekcji cech - 2. Selekcja genów lub białek o ekspresji różnicującej dwie grupy próbek przy użyciu metody Recursive Feature Elimination

1 OPIS PROBLEMU

Celem projektu była implementacja algorytmu SVM-RFE oraz sprawdzenie, jak ta metoda selekcji cech wpływa na skuteczność klasyfikacji binarnej.

1.1 SVM

SVM to algorytm uczenia maszynowego, tworzący specyficzny model sieci neuronowej, w której pod uwagę brane są jedynie najtrudniej separowalne punkty przestrzeni, zwane wektorami nośnymi. Jej uczenie polega na dobieraniu wag w celu maksymalizacji marginesu (separującego skrajne punkty), który definiuje w ten sposób różne klasy. Sieci te używane są głównie w zadaniach klasyfikacji, w których w sposób jednoznaczny rozdzielają jedną klasę od pozostałych, zwracając wynik z zakresu {-1,1}.

1.2 RECURSIVE FEATURE ELIMINATION

Algorytm SVM-RFE został zaproponowany w 2002 roku[1]. Przy badaniach danych biologicznych obserwowany jest wysoki stopień korelacji między składowymi. Dodatkowo w danych zdarzają się cechy, które nie pomagają w poprawnej klasyfikacji i mogą być uznane za szum. Dlatego tak ważny jest wybór odpowiedniej liczby cech dla danego zadania. Jeśli wartościowych cech będzie zbyt mało, model nie będzie w stanie spełnić swojego zadania. Gdy cech będzie zbyt dużo, a większość z nich nie będzie wartościowa, model będzie trudniejszy w budowie i treningu. "Dobre" cechy ułatwiają modelowanie i pozwalają uzyskać lepsze wyniki, natomiast "złe" mogą sprawić, że do osiągnięcia tego samego poziomu skuteczności trzeba będzie zbudować bardziej skomplikowany model.

Zasada działania SVM-RFE[1]:

- wejście:
  - zbiór wektorów uczących: $\mathbf{X}_0 = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, ..., \mathbf{x}_k, ..., \mathbf{x}_l]^{\mathrm{T}}$
  - zbiór etykiet klas: $y = [y_1, y_2, ..., y_k, ..., y_l]^{\mathrm{T}}$
- inicjalizacja:
  - podzbiór pozostałych cech: $\mathbf{s} = [1, 2, ..., n]$
  - lista z rankingiem cech: $r = []$

- powtarzaj aż $\mathbf{s} = []$:
  - ogranicz zbiór uczący tak, by zawierał tylko pozostałe cechy: $X = X_0(:, \mathbf{s})$
  - wytrenuj klasyfikator `SVM`
  - oblicz wektor wag $\mathbf{w}$ na podstawie współczynników stworzonego `SVM`
  - oblicz ranking cech: $c_i = (w_i)^2$
  - znajdź cechę o najniższym ranking: $f = argmin(\mathbf{c})$
  - zaktualizuj listę z rankingiem cech: $\mathbf{r} = [\mathbf{s}(f), r]$
  - usuń cechę o najniższym rankingu: $s = \mathbf{s}(1 : f-1, f+1 : length(\mathbf{s}))$
- wyjście: lista z rankingiem cech $\mathbf{r}$.

2 Szczegóły implementacyjne

Algorytm `RFE` został zaimplementowany samodzielnie w języku Python w wersji 3.6. Wykorzystano również gotowe biblioteki napisane w tym języku:

- *pandas* i *numpy* - do przygotowania zbiorów do formatu akceptowanego przez bibliotekę *scikit-learn*,
- *scikit-learn* - do budowy maszyny wektorów nośnych oraz do przeprowadzenia sprawdzianu krzyżowego zbudowanych modeli,
- *matplotlib* - do wizualizacji wyników.

Analiza została przeprowadzona w *Jupyter Notebooku*. W zeszycie **analiza_wstepna.ipynb** pokazano, jak wygląda zbiór danych i jakie transformacje należy na nim przeprowadzić, aby można było wykorzystać go do budowy `SVM` z *sklearna*. Pozostała część kodu i reszta analizy znajduje się w zeszycie **18z_mpb.ipynb** (zeszyt ten razem z przebiegiem eksperymentów dostępny jest pod adresem `https://nbviewer.jupyter.org/github/Sowul/18z_mpb/blob/master/18z_mpb.ipynb` lub `https://18zmpb-anon20vjga.notebooks.azure.com/j/notebooks/18z_mpb.ipynb`).

W związku z tym, że wszystkie zbiory danych są w tym samym formacie (tsv, czyli tab-separated values) i mają taką samą strukturę, proces ich przetwarzania można było zautomatyzować. Odpowiada za to funkcja **prepare_data**, która na wejściu przyjmuje nazwę pliku, a zwraca macierz ze zbiorem trenującym, listę etykiet klas dla poszczególnych próbek oraz słownik zawierający nazwy poszczególnych cech, który posłuży do ich identyfikacji w końcowym etapie analizy.

Następną sekcją zeszytu jest **Ładowanie danych**, gdzie przetwarzane są wszystkie pliki, a zbiory danych, etykiety i słowniki tarfiają do odpowiednich tablic, które ułatwią dalszą automatyzację testów.

Kolejne komórki to już **implementacja algorytmu** `RFE`. Nie udało się jej wykonać w "czystym" Pythonie, ponieważ skorzystano z jednej z możliwości jakie daje biblioteka *numpy*, a

mianowicie *boolean masking*[1]. Implementacja nie była zbyt skomplikowana i została przeprowadzona według schematu pokazanego w sekcji o RFE (1.2). Skorzystano ze znanej funkcji **ordinal**, która posłużyła do formatowania numeru iteracji w pętli while w trybie verbose, który jest częścią funkcji **recursive_feature_elimination**. Funkcja ta przyjmuje zbiór uczący i listę etykiet, a zwraca ranking cech w formie listy tupli w formacie (numer cechy, ranking), słownik z rankingiem (kluczem jest numer cechy, a wartością jej ranking) oraz listę wyników sprawdzianu krzyżowego przeprowadzonego w trakcie procesu eliminacji cech, posortowaną zgodnie z rosnącą liczbą wykorzystanych w procesie uczenia cech. Algorytm jest następnie testowany na znanym zbiorze *digits*.

Kolejne komórki przedstawiają **funkcję pomocniczną do robienia wykresów** średniej wartości metryki *accuracy* dla 2-fold CV w funkcji liczby wybranych cech. Funkcja pozwala na wybranie "punktu odcięcia" wykresu, z uwagi na to, że skuteczność klasyfikacji dla dużej liczby cech nie zmienia się zbyt szybko lub utrzymuje się na stałym poziomie, przez co nie jest interesująca.

3 Przeprowadzone testy

Komórka 10 to już właściwe testy algorytmu. Korzystając z przetworzonych wcześniej zbiorów danych, algorytm uruchamiany jest w pętli for dla każdego zbioru osobno, a wyniki zbierane są do słownika (na najwyższym poziomie kluczem jest nazwa przetwarzanego zbioru, na niższym klucze to *final_ranking, ranking_dict* i *cv_results*.

Algorytm sprawdzony został na zbiorach *Leukemia, LungCancer* i *Lymphoma* w wersji *_preprocessed* i *500*. Zbiory *_preprocessed* to zbiory wstępnie przetworzone, zawierające mniej cech niż zbiory oryginalne, ale wciąż znacząco większe od zbiorów *500*.

Zbiory *500* można traktować jak zbiór cech wybranych na podstawie metod statystycznych. Dlatego pierwsze pytanie, jakie można zadać brzmi: jak bardzo będą się różniły cechy ze zbiorów *500* od 500 cech wybranych przez RFE? Następnie zbadano, który ze zbiorów (już równolicznych) pozwoli na wytrenowanie lepszego modelu. Ostatnim etapem analizy było porównanie zbiorów najlepszych cech. Do tego celu stworzono 2 funkcje pomocnicze:

- *get_best_features* - zwraca nazwy *n* wybranych najlepszych cech,
- *compare_sets* - porównuje zbiory cech.

4 Wyniki eksperymentów

4.1 Wybranie 500 cech

Po wybraniu ze zbiorów *preprocessed* 500 cech sprawdzono stosunek liczby wspólnych cech między zbiorami *preprocessed* i *500* do liczności zbioru *preprocessed* oraz do sumy tych zbiorów. Wyniki przedstawiają Tabela 4.1 i 4.2.

[1] https://docs.scipy.org/doc/numpy-1.15.0/user/basics.indexing.html#boolean-or-mask-index-arrays

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	48.2
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	10.8
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	44.83

Tabela 4.1: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności zbioru *preprocessed* dla 500 wybranych cech.

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	31.75
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	5.708
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	28.86

Tabela 4.2: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności sumy tych zbiorów dla 500 wybranych cech.

4.2 Porównanie skuteczności klasyfikacji

Oba zbiory *Lymphoma* klasyfikowały ze 100% skutecznością już dla pojedynczej cechy. Nie jest to interesujące z punktu widzenia działania RFE, dlatego zamieszczono tylko po jednym wykresie. Wszystkie wykresy umieszczono na końcu sprawozdania. Wyniki klasyfikacji przedstawia Tabela 4.3.

4.3 Porównanie najlepszych wybranych cech

W Tabeli 4.4 zestawiono minimalną liczbę cech, dla której osiągnięto najlepszy średni wynik klasyfikacji. Kolejne wykresy również przedstawiają te zależności. Podobnie jak w Sekcji 4.1, sprawdzono, jak podobne są uzyskane zbiory. Wyniki przedstawione są w Tabelach 4.5, 4.6, 4.7 i 4.8.

4.3.1 Listy cech

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *Leukemia_preprocessed*:

Zbiór	Accuracy
Leukemia_preprocessed	1.000
Leukemia_500	1.000
LungCancer_preprocessed	0.994
LungCancer_500	0.962
Lymphoma_preprocessed	1.000
Lymphoma_500	1.000

Tabela 4.3: Średnia wartość accuracy uzyskana w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze złożonym z 500 cech.

Zbiór	Liczba cech
Leukemia_preprocessed	3
Leukemia_500	7
LungCancer_preprocessed	6
LungCancer_500	16
Lymphoma_preprocessed	1
Lymphoma_500	1

Tabela 4.4: Zestawienie liczby cech, dla której osiągnięto najlepszy wynik klasyfikacji dla danego zbioru.

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	65.0
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	15.0
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	63.16

Tabela 4.5: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności zbioru *preprocessed* dla 20 wybranych cech.

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	48.15
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	8.108
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	48.0

Tabela 4.6: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności sumy tych zbiorów dla 20 wybranych cech.

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	20.0
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	0.0
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	80.0

Tabela 4.7: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności zbioru *preprocessed* dla 5 wybranych cech.

Zbiory	Stosunek w %
Leukemia_preprocessed i Leukemia_500	11.11
LungCancer_preprocessed i LungCancer_500	0.0
Lymphoma_preprocessed i Lymphoma_500	66.67

Tabela 4.8: Stosunek liczby wspólnych cech zbiorów do liczności sumy tych zbiorów dla 5 wybranych cech.

1. M11722_at
2. X95735_at
3. U70063_at

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *Leukemia_500*:

1. U70063_at
2. M31166_at
3. D88270_at
4. L09209_s_at
5. M96326_rna1_at
6. U72621_at
7. X06948_at

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *LungCancer_preprocessed*:

1. 33109_f_at
2. 41449_at
3. 38202_at
4. 39240_at
5. 1005_at
6. 37332_r_at

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *LungCancer_500*:

1. 34091_s_at
2. 35999_r_at
3. 40079_at
4. 36040_at
5. 37148_at
6. 37345_at

7. 35726_at
8. 33218_at
9. 36133_at
10. 41424_at
11. 32138_at
12. 33343_at
13. 41385_at
14. 41620_at
15. 41691_at
16. 34265_at

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *Lymphoma_preprocessed*:

1. (Unknown; Clone=1352493)

Lista cech, dla której uzyskano największą wartość metryki accuracy na zbiorze *Lymphoma_500*:

1. (Unknown; Clone=1352493)

5 PODSUMOWANIE

Z uwagi na "dydaktyczny" charakter zbiorów danych, ciężko wyciągnąć wnioski na temat wpływu zastosowanego algorytmu `RFE` na skuteczność klasyfikacji. Można natomiast porównać jego działanie z innym sposobem wyboru cech, które znalazły się w zbiorach typu *500*. O ile zbiory Leukemia i Lymphoma dzielą około 50% cech wśród 500 wstępnie wybranych, to zbiór *LungCancer_preprocessed* przetworzony algorytmem `RFE` znacząco różni się od zbioru *LungCancer_500* - dzielą one tylko 11% cech w odniesieniu do zbioru *preprocessed* oraz mają poniżej 6% cech wspólnych. Udział cech wspólnych w sumie obu zbiorów dla 20 wybranych cech poprawia się tylko nieznacznie (do 8%). Dla 5 najlepszych cech iloczyn tych zbiorów jest pusty.

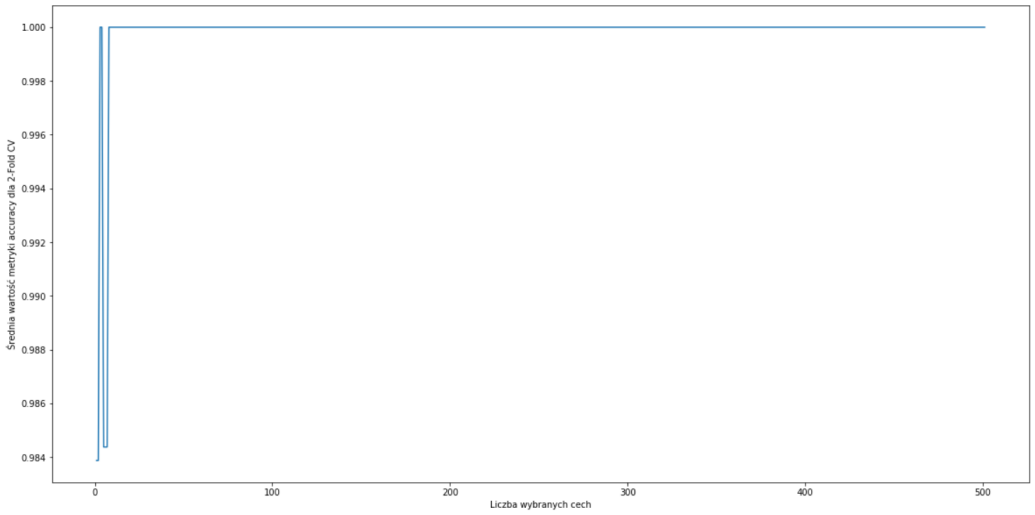
Przy dalszej selekcji cech, z 500 do 20, dla zbiorów *Leukemia* i *Lymphoma* można zauważyć podobną tendencję - wzrost udziału wybranych cech ze zbioru *preprocessed* w zbiorze *500*, odpowiednio z 48% do 65% i z 45% do 63%. Podobnie jest z udziałem cech wspólnych w stosunku do sumy odpowiednich zbiorów *preprocessed* i *500* z 32% w przypadku *Leukemia* i z 28% *Lymphoma* do 48% dla 20 wybranych cech.

Zmniejszając badany zbiór do 5 najlepszych cech widać zupełnie odmienne zachowanie obu zbiorów. Tylko 1 cecha jest wspólna dla zbiorów *Leukemia_preprocessed* i *Leukemia_500*, a dla zbiorów *Lymphoma_preprocessed* i *Lymphoma_500* są to aż 4 z 5 cech.

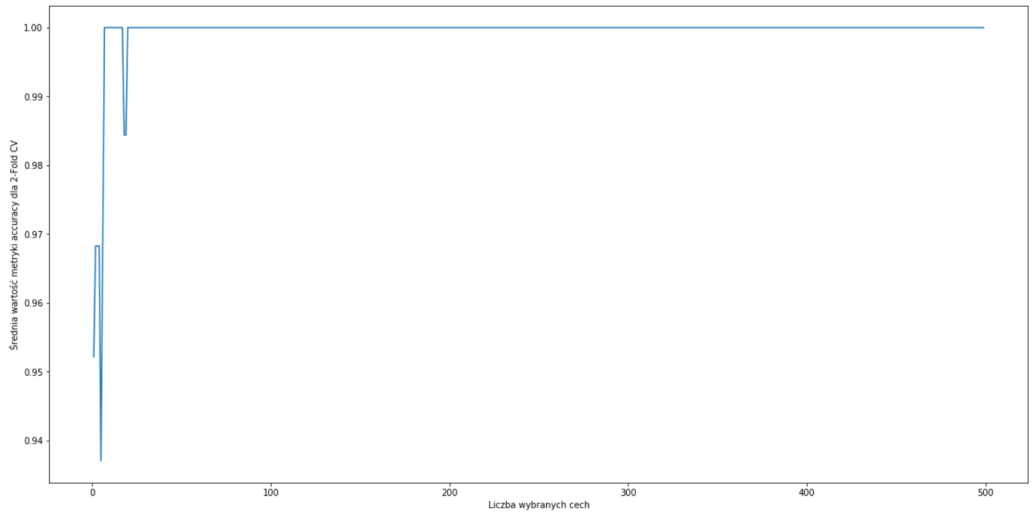
Algorytm SVM-RFE wydaje się być ciekawą, a jednocześnie prostą do zrozumienia i zaimplementowania, techniką selekcji cech, która może być stosowana zarówno do wstępnego wybrania cech, jak i do dalszego zawężania ich zbioru. Nie niesie on jednak informacji o poziomie przydatności danej cechy, więc warto stosować go w połączeniu na przykład z walidacją krzyżową lub innymi technikami oceny i selekcji cech.

BIBLIOGRAFIA

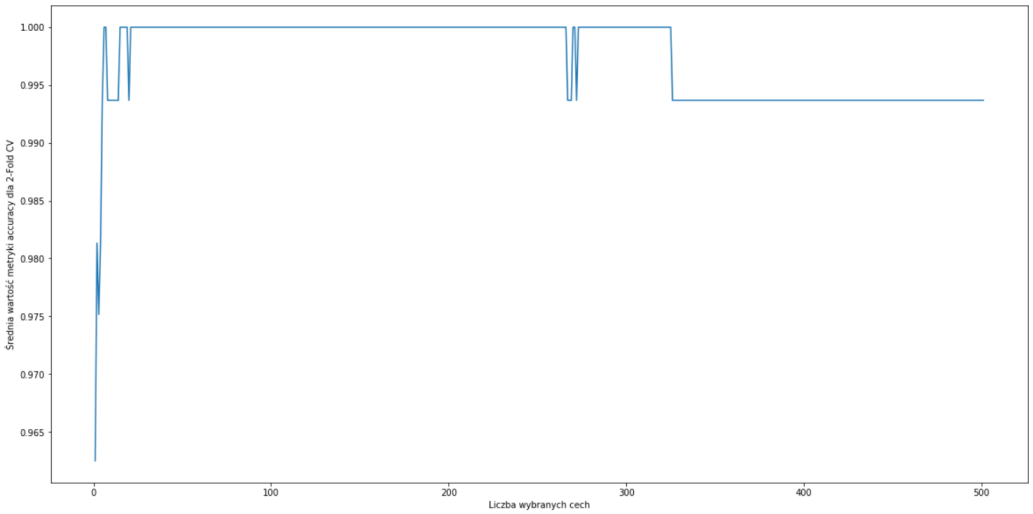
[1] Guyon, I., Weston, J., Barnhill, S. et al., *Gene Selection for Cancer Classification using Support Vector Machines*, Machine Learning (2002) 46: 389., https://doi.org/10.1023/A:1012487302797.



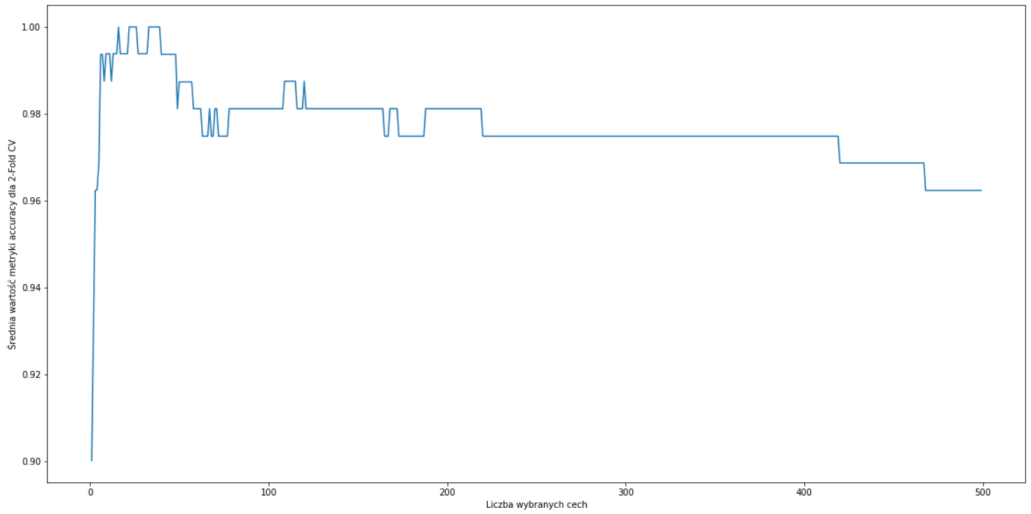
Rysunek 5.1: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Leukemia_preprocessed złożonym z 500 najlepszych cech.



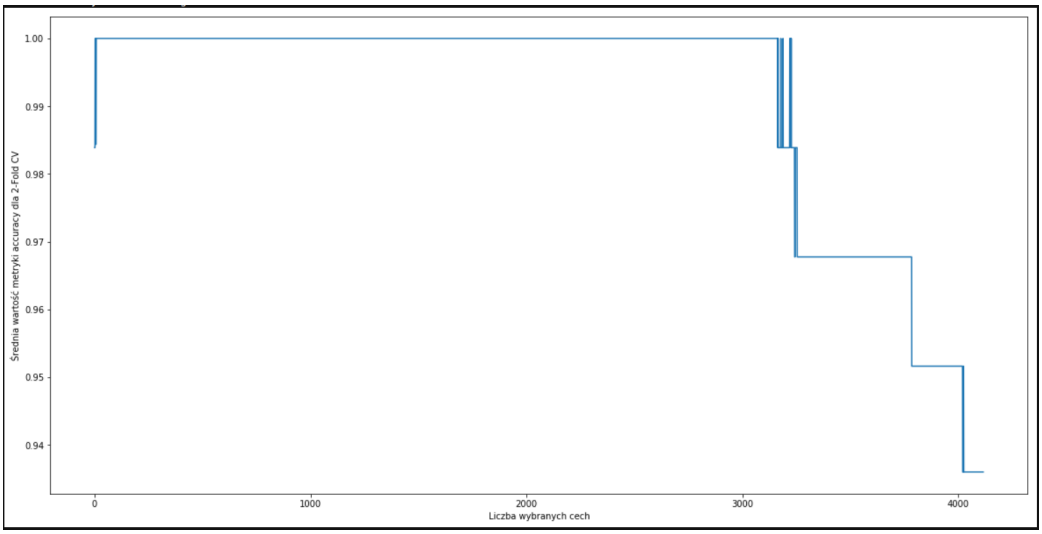
Rysunek 5.2: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Leukemia_500 złożonym z 500 najlepszych cech.



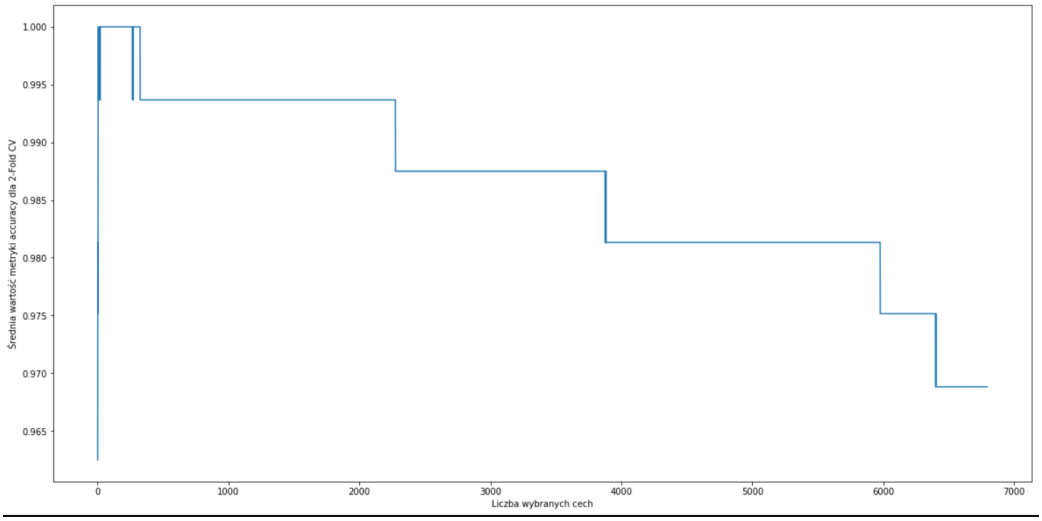
Rysunek 5.3: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze LungCancer_preprocessed złożonym z 500 najlepszych cech.



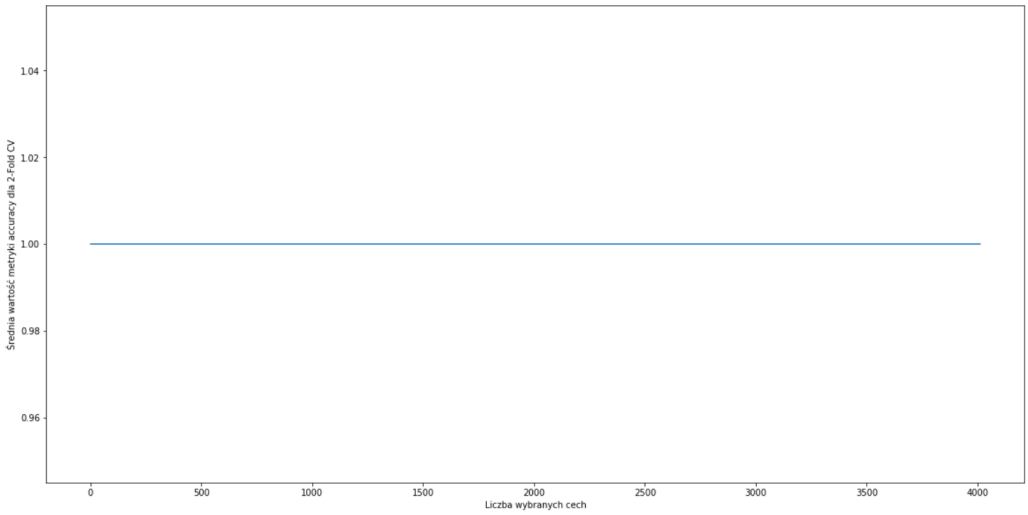
Rysunek 5.4: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze LungCancer_500 złożonym z 500 najlepszych cech.



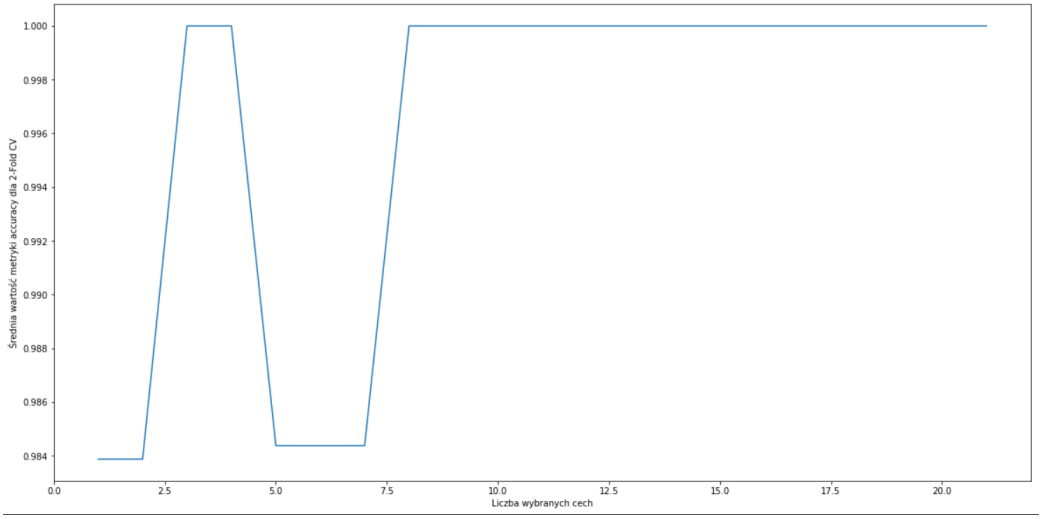
Rysunek 5.5: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Leukemia_preprocessed.



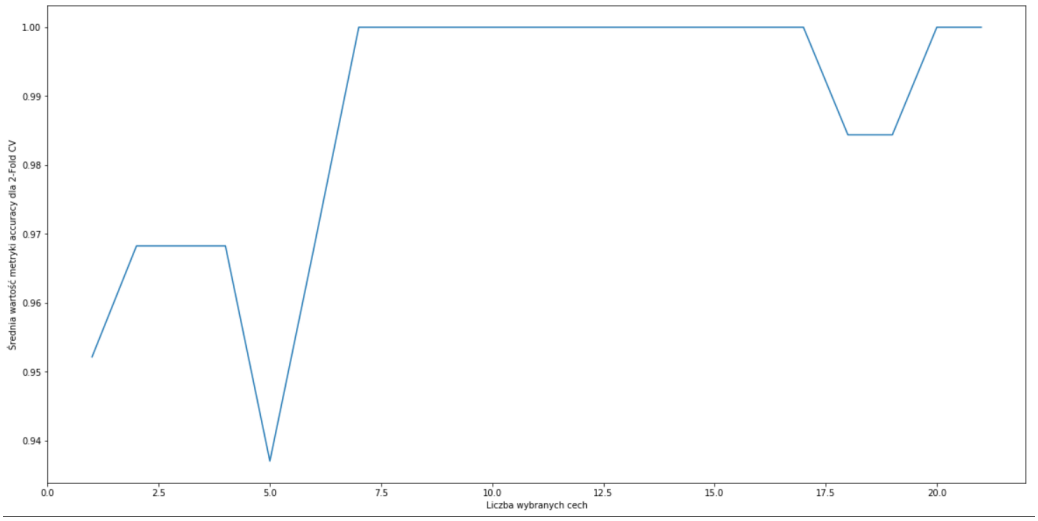
Rysunek 5.6: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze LungCancer_preprocessed.



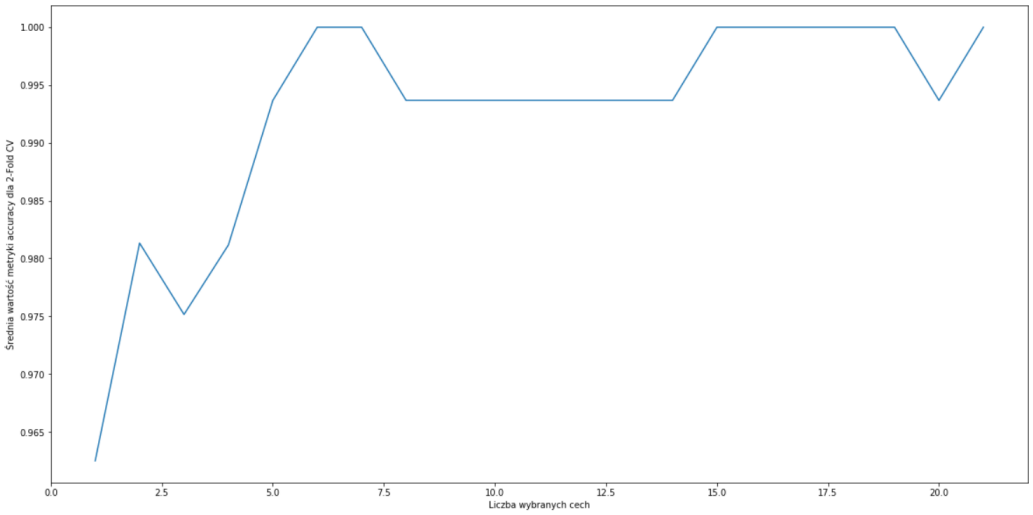
Rysunek 5.7: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Lymphoma_preprocessed.



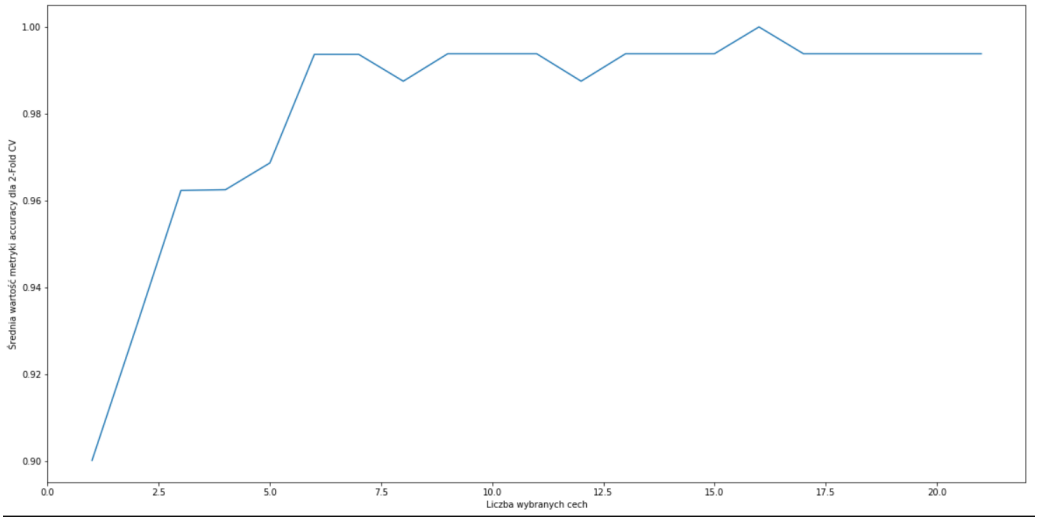
Rysunek 5.8: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Leukemia_preprocessed złożonym z 20 najlepszych cech.



Rysunek 5.9: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze Leukemia_500 złożonym z 20 najlepszych cech.



Rysunek 5.10: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze LungCancer_preprocessed złożonym z 20 najlepszych cech.



Rysunek 5.11: Wykres średniej wartości metryki accuracy uzyskanej w 2-fold CV w procesie uczenia na zbiorze LungCancer_500 złożonym z 20 najlepszych cech.