Sprawozdanie z Laboratorium 2

Autorzy: Mateusz Pawliczek, Piotr Świerzy

Data: 18.03.25

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 różnią się charakterystyką wzrostu. Istotne cechy to m.in. promień i tekstura, które są wyznaczane za pomocą diagnostyki obrazowej i biopsji.

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 nowotwór jest złośliwy, czy łagodny. Pozostałe 30 kolumn zawiera cechy, tj. charakterystyki nowotworu.

a) Na początku importujemy potrzebne nam na później biblioteki, a później otwieramy pliki i zapisujemy je jako *DataFrame*.

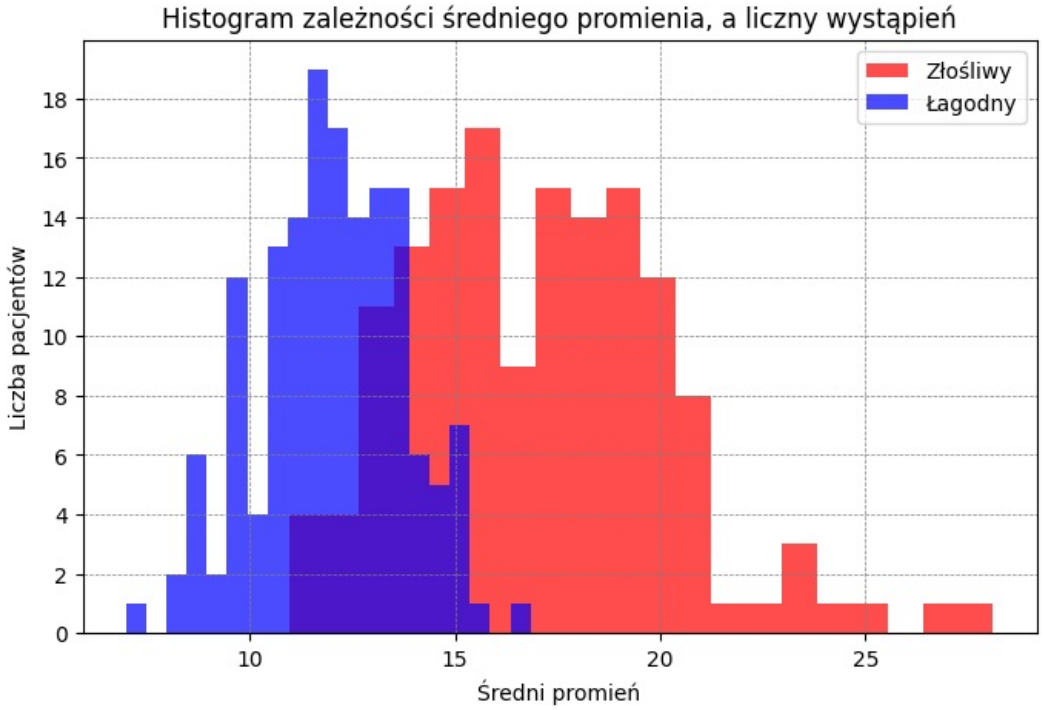
In [1]:
```
import os
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.linalg
from sklearn.metrics import confusion_matrix

dataset_dir = os.path.join(os.getcwd(), "dataset")

columns = pd.read_csv(os.path.join(dataset_dir, "breast-cancer.labels"), header=None).squeeze().tolist()
train_data = pd.read_csv(os.path.join(dataset_dir, "breast-cancer-train.dat"), names=columns)
validate_data = pd.read_csv(os.path.join(dataset_dir, "breast-cancer-validate.dat"), names=columns)
```

b) Następnie rysujemy histogram, który pokazuje zależność między średnim promieniem nowotworu a liczbą wystąpień nowotworów, z rozróżnieniem na nowotwory złośliwe i łagodne.

In [2]:
```
malignant = train_data[train_data["Malignant/Benign"] == "M"]
benign = train_data[train_data["Malignant/Benign"] == "B"]
feature = "radius (mean)"
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.hist(malignant[feature], bins=20, alpha=0.7, label="Złośliwy", color="red")
plt.hist(benign[feature], bins=20, alpha=0.7, label="Łagodny", color="blue")
plt.xlabel("Średni promień")
plt.ylabel("Liczba pacjentów")
plt.title("Histogram zależności średniego promienia, a liczny wystąpień")
plt.legend()
plt.grid(color='gray', linestyle='--', linewidth=0.5)
plt.yticks(np.arange(0, 20, 2))
plt.show()
```



Widać, że zazwyczaj jeśli mamy doczynienia z większym promieniem nowotworu, okazuje się być złośliwy.

c) Kolejnym krokiem jest przygotowanie macierzy dla **liniowej** *(wszystkie 30 cech)* i **kwadratowej** *(4 cechy podane w liście* `selected_features` *)* metody najmniejszych kwadratów. Robimy to zarówno dla danych treningowych, jak i danych walidacyjnych.

In [3]:
```
selected_features = ["radius (mean)", "perimeter (mean)", "area (mean)", "symmetry (mean)"]
A_training_lin = np.c_[np.ones(train_data.shape[0]), train_data.iloc[:, 2:].values]
A_validate_lin = np.c_[np.ones(validate_data.shape[0]), validate_data.iloc[:, 2:].values]

interaction_terms = [train_data[selected_features[i]] * train_data[selected_features[j]] for i in range(len(sel
interaction_terms_validate = [validate_data[selected_features[i]] * validate_data[selected_features[j]] for i i

A_training_quad = np.c_[np.ones(train_data.shape[0]), train_data[selected_features].values,
                        np.column_stack(interaction_terms)]
A_validate_quad = np.c_[np.ones(validate_data.shape[0]), validate_data[selected_features].values,
                        np.column_stack(interaction_terms_validate)]
```

Możemy sprawdzić wielkość tych macierzy, aby zobaczyć czy wszystko się poprawnie zrobiło.

In [4]:
```
print("Rozmiar macierzy A_train_lin: ", A_training_lin.shape)
print("Rozmiar macierzy A_train_quad: ", A_training_quad.shape)
print("Rozmiar macierzy A_validate_lin: ", A_validate_lin.shape)
print("Rozmiar macierzy A_validate_quad: ", A_validate_quad.shape)
```

```
Rozmiar macierzy A_train_lin:  (300, 31)
Rozmiar macierzy A_train_quad:  (300, 14)
Rozmiar macierzy A_validate_lin:  (260, 31)
Rozmiar macierzy A_validate_quad:  (260, 14)
```

d) Następnie tworzymy dwa wektory b (dla danych testowych i walidacyjnych), które będą odpowiedziami czy dany nowotwór jest złośliwy (wtedy będzie równy 1) czy łagodny (wtedy będzie równy -1).

In [5]:
```
b_training = np.where(train_data["Malignant/Benign"] == "M", 1, -1)
b_validate = np.where(validate_data["Malignant/Benign"] == "M", 1, -1)
```

e) Za pomocą tych macierzy jesteśmy w stanie obliczyć wagi dla liniowej oraz kwadratowej reprezentacji najmniejszych kwadratów. W tym celu korzystamy z następującego wzoru:

$$(A^T A)w = A^T b$$

Wysoka waga oznacza, że dana cecha jest bardzo liniowo zależna od tego, że dany nowotwór jest złośliwy lub łagodny, czyli silnie wpływa na przewidywanie klasy nowotworu. W takim przypadku, dana cecha ma duży wpływ na model, a jej obecność w zbiorze cech jest kluczowa dla dokładności predykcji. Wartości wag bliskie 0 oznaczają natomiast, że cecha ma niewielki wpływ na klasyfikację i nie wnosi istotnej informacji do modelu.

In [6]:
```
lin_weight = np.linalg.solve(A_training_lin.T @ A_training_lin, A_training_lin.T @ b_training)
quad_weight = np.linalg.solve(A_training_quad.T @ A_training_quad, A_training_quad.T @ b_training)

print("Waga w reprezentacji liniowej: ")
for i in range(1, len(columns)-1):
    if i == 1: print("{:<30} {:>10.6f}".format("bias ", lin_weight[i]))
```

```
    else: print("{:<30} {:>10.6f}".format(columns[i], lin_weight[i]))
```

```
Waga w reprezentacji liniowej:
bias                           -0.607588
radius (mean)                   0.024537
texture (mean)                  0.078325
perimeter (mean)                0.000578
area (mean)                     8.807513
smoothness (mean)              -9.195525
compactness (mean)              0.373832
concavity (mean)                3.659996
concave points (mean)          -3.237545
symmetry (mean)                 6.688689
fractal dimension (mean)        1.144291
radius (stderr)                 0.043649
texture (stderr)               -0.061307
perimeter (stderr)             -0.001738
area (stderr)                  29.207437
smoothness (stderr)             2.825510
compactness (stderr)           -4.344522
concavity (stderr)             18.721965
concave points (stderr)        -7.618858
symmetry (stderr)              -30.504055
fractal dimension (stderr)      0.338193
radius (worst)                  0.008098
texture (worst)                 0.008923
perimeter (worst)              -0.002446
area (worst)                   -2.386699
smoothness (worst)             -0.436881
compactness (worst)             0.540824
concavity (worst)               2.013278
concave points (worst)          3.086857
symmetry (worst)               10.529672
```

In [7]:
```
print("Waga w reprezentacji kwadratowej: ")
for i in range(2*len(selected_features) + 1):
    if i == 0: print("{:<30} {:>10.6f}".format("bias ", quad_weight[i]))
    elif i <= len(selected_features): print("{:<30} {:>10.6f}".format(selected_features[i-1], quad_weight[i]))
    else: print("{:<30} {:>10.6f}".format(selected_features[i-len(selected_features)-1] + " kwadrat", quad_weigl
```

```
Waga w reprezentacji kwadratowej:
bias                           14.600898
radius (mean)                  -6.898389
perimeter (mean)                0.533031
area (mean)                     0.038236
symmetry (mean)               -32.782169
radius (mean) kwadrat          -0.307689
perimeter (mean) kwadrat        0.207136
area (mean) kwadrat            -0.006197
symmetry (mean) kwadrat        -4.934342
```

Wartości wag mogą być zarówno dodatnie, jak i ujemne. Dodatnia waga oznacza, że wzrost danej cechy zwiększa prawdopodobieństwo przypisania próbki do danej klasy (np. nowotworu złośliwego), podczas gdy ujemna waga sugeruje odwrotną zależność – wzrost cechy zmniejsza prawdopodobieństwo przypisania do tej klasy.
Jeśli cechy są silnie skorelowane, ich wagi mogą być trudne do interpretacji. Może się zdarzyć, że duże wartości wag kompensują się nawzajem, co utrudnia ocenę rzeczywistego wpływu poszczególnych zmiennych. W takich przypadkach często stosuje się metody redukcji wymiarowości, np. PCA, lub regresję grzbietową (podpunkt f), aby poprawić interpretowalność modelu.

f) Następnie staramy się znaleźć wagi za pomocą funkcji `scipy.linalg.lstsq` oraz wagi dla ustandaryzowanej reprezantacji liniowej. Do czego korzystamy z następującego wzoru:

$$(A^TA + \lambda I)w = A^Tb$$

Robi sie to w taki sposób, aby zapobiec dominowaniu małych wartości własnych w macierzy A^TA i poprawić jej uwarunkowanie.

In [8]:
```
lin_weight_lstsq = scipy.linalg.lstsq(A_training_lin, b_training)[0]
print("Waga w reprezentacji liniowej (lstsq): ")
for i in range(1, len(columns)-1):
    if i == 1: print("{:<30} {:>10.6f}".format("bias ", lin_weight_lstsq[i]))
    else: print("{:<30} {:>10.6f}".format(columns[i], lin_weight_lstsq[i]))
```

```
Waga w reprezentacji liniowej (lstsq):
bias                            -0.607588
radius (mean)                    0.024537
texture (mean)                   0.078325
perimeter (mean)                 0.000578
area (mean)                      8.807513
smoothness (mean)               -9.195525
compactness (mean)               0.373832
concavity (mean)                 3.659996
concave points (mean)           -3.237545
symmetry (mean)                  6.688689
fractal dimension (mean)         1.144291
radius (stderr)                  0.043649
texture (stderr)                -0.061307
perimeter (stderr)              -0.001738
area (stderr)                   29.207437
smoothness (stderr)              2.825510
compactness (stderr)            -4.344522
concavity (stderr)              18.721965
concave points (stderr)         -7.618858
symmetry (stderr)               -30.504055
fractal dimension (stderr)       0.338193
radius (worst)                   0.008098
texture (worst)                  0.008923
perimeter (worst)               -0.002446
area (worst)                    -2.386699
smoothness (worst)              -0.436881
compactness (worst)              0.540824
concavity (worst)                2.013278
concave points (worst)           3.086857
symmetry (worst)                10.529672
```

Wyniki te są takie same jak poprzednie, co jest poprawne, bo zmieniliśmy tylko sposób liczenia.

In [9]:
```
lambda_ = 0.01
I = np.eye(A_training_lin.shape[1])
I[0,0] = 0
w_ridge = np.linalg.solve(A_training_lin.T @ A_training_lin + lambda_ * I, A_training_lin.T @ b_training)
print("Waga w reprezentacji liniowej z regularyzacją λ=0.01: ")
for i in range(1, len(columns)-1):
    if i == 1: print("{:<30} {:>10.6f}".format("bias ", w_ridge[i]))
    else: print("{:<30} {:>10.6f}".format(columns[i], w_ridge[i]))
```

```
Waga w reprezentacji liniowej z regularyzacją λ=0.01:
bias                            -0.246760
radius (mean)                    0.029216
texture (mean)                   0.023132
perimeter (mean)                 0.000662
area (mean)                      3.404644
smoothness (mean)               -5.127520
compactness (mean)              -0.029314
concavity (mean)                 3.553629
concave points (mean)           -2.177167
symmetry (mean)                  0.468101
fractal dimension (mean)         0.974968
radius (stderr)                  0.050205
texture (stderr)                -0.002911
perimeter (stderr)              -0.003107
area (stderr)                    3.213225
smoothness (stderr)              0.613753
compactness (stderr)            -2.727758
concavity (stderr)               2.539944
concave points (stderr)         -1.532306
symmetry (stderr)               -0.402055
fractal dimension (stderr)       0.323679
radius (worst)                   0.004253
texture (worst)                  0.005253
perimeter (worst)               -0.002272
area (worst)                     3.086705
smoothness (worst)              -0.199086
compactness (worst)              0.505666
concavity (worst)                3.020341
concave points (worst)           1.796502
symmetry (worst)                 4.432934
```

g) Następnie liczymy współczynniki uwarunkowania macierzy, cond(ATA), dla liniowej i kwadratowej metody najmniejszych kwadratów. Wzór na to jest następujący:

$$cond(A^TA) = \frac{\sigma_{min}(A^TA)}{\sigma_{max}(A^TA)}$$

In [10]:
```
ATA_linear = A_training_lin.T @ A_training_lin
```

```
condition_num_linear = np.linalg.cond(ATA_linear)

ATA_quad = A_training_quad.T @ A_training_quad
condition_num_quad = np.linalg.cond(ATA_quad)

print("Wartość cond(ATA) dla liniowej metody najmniejszych kwadratów: " , condition_num_linear)
print("Wartość cond(ATA) dla kwadratowej metody najmniejszych kwadratów: ", condition_num_quad)
```

```
Wartość cond(ATA) dla liniowej metody najmniejszych kwadratów:  2104550664831.374
Wartość cond(ATA) dla kwadratowej metody najmniejszych kwadratów:  4.077341569402509e+17
```

Wysoki współczynnik uwarunkowania oznacza, że macierz jest źle uwarunkowana, co prowadzi do niestabilności numerycznej.
Małe zmiany w danych mogą powodować duże zmiany w wagach, co utrudnia interpretację wyników.
Niski współczynnik uwarunkowania wskazuje na stabilność i wiarygodność wag.

f) Ostatnim krokiem jest sprawdzenie jak dobrze nasze wagi przewidują typ nowotworu. Do tego celu korzystamy z danych walidacyjnych.
Zakładamy, że wynik >0 oznacza nowotwór złośliwy a wynik <=0 nowotwór łagodny. Dokładność metody oznaczamy za pomocą wzoru:

$$acc = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}$$

Gdzie:
TP– liczba przypadków prawdziwie dodatnich
TN– liczba przypadków prawdziwie ujemnych
FP– liczba przypadków fałszywie dodatnich
FN– liczba przypadków fałszywie ujemnych.

In [11]:
```
p_lin = A_validate_lin @ lin_weight
p_quad = A_validate_quad @ quad_weight
p_ridge = A_validate_lin @ w_ridge

predictions_lin = np.where(p_lin > 0, 1, -1)
conf_matric_lin = confusion_matrix(b_validate, predictions_lin)
TP = conf_matric_lin[1, 1] # złośliwy
TN = conf_matric_lin[0, 0] # łagodny
FP = conf_matric_lin[0, 1] # łagodny jako złośliwy
FN = conf_matric_lin[1, 0] # złośliwy jako łagodny
lin_acc = (TP + TN) / (TP + TN + FP + FN)

predictions_quad = np.where(p_quad > 0, 1, -1)
conf_matric_quad = confusion_matrix(b_validate, predictions_quad)
TP = conf_matric_quad[1, 1] # złośliwy
TN = conf_matric_quad[0, 0] # łagodny
FP = conf_matric_quad[0, 1] # łagodny jako złośliwy
FN = conf_matric_quad[1, 0] # złośliwy jako łagodny
quad_acc = (TP + TN) / (TP + TN + FP + FN)

predictions_ridge = np.where(p_ridge > 0, 1, -1)
conf_matric_ridge = confusion_matrix(b_validate, predictions_ridge)
TP = conf_matric_ridge[1, 1] # złośliwy
TN = conf_matric_ridge[0, 0] # łagodny
FP = conf_matric_ridge[0, 1] # łagodny jako złośliwy
FN = conf_matric_ridge[1, 0] # złośliwy jako łagodny
ridge_acc = (TP + TN) / (TP + TN + FP + FN)

print("Macierz pomyłek dla metody liniowej\n", conf_matric_lin)
print("Dokładność: ", round(lin_acc, 2), "\n")
print("Macierz pomyłek dla metody kwadratowej\n", conf_matric_quad)
print("Dokładność: ", round(quad_acc, 2), "\n")
print("Macierz pomyłek dla metody liniowej z regularyzacją\n", conf_matric_ridge)
print("Dokładność: ", round(ridge_acc, 2))
```

```
Macierz pomyłek dla metody liniowej
 [[195   5]
 [  2  58]]
Dokładność:  0.97

Macierz pomyłek dla metody kwadratowej
 [[186  14]
 [  5  55]]
Dokładność:  0.93

Macierz pomyłek dla metody liniowej z regularyzacją
 [[196   4]
 [  2  58]]
Dokładność:  0.98
```

Metoda liniowa osiągnęła lepszą dokładność (97%) niż metoda kwadratowa (93%), co sugeruje, że prostszy model z większą ilością kolumn lepiej dopasowuje się do danych i unika przeregulowania.
Model kwadratowy popełnia więcej błędów fałszywie dodatnich (14 vs. 5) oraz fałszywie ujemnych (5 vs. 2), co oznacza gorszą

skuteczność w klasyfikacji.
Dodanie regularyzacji do modelu liniowego poprawiło dokładność do 98%, co pokazuje, że delikatna regularyzacja może zwiększyć ogólną wydajność modelu i zmniejszyć ryzyko przeuczenia.
W rezultacie najlepszym podejściem w tym przypadku jest model liniowy z regularyzacją, ponieważ zapewnia najwyższą dokładność i najmniejszą liczbę błędów.