Asignatura: Extracción de características en imágenes

Curso 2019-2020

Máster: Ciencia de Datos e Ingeniería de Computadores

Práctica III: Uso de Procesos Gaussianos para clasificación

El objetivo de esta práctica es aprender a utilizar los Procesos Gaussianos (GP) en un problema de clasificación y discutir los resultados obtenidos.

Vamos a utilizar una base de datos de imágenes histológicas de cáncer de próstata. La figura 1 contiene varias imágenes de tejido histológico sano y cancerígeno. Con el uso de microscopio, las imágenes son observables a diferentes resoluciones.

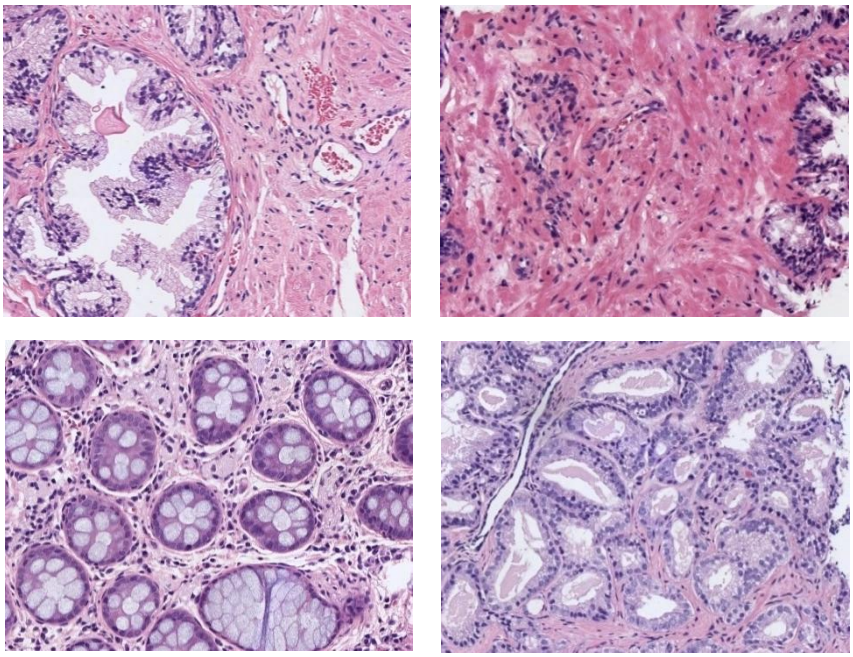


Figura 1. Imágenes de tejido sano (panel superior) y de tejido cancerígeno (panel inferior).

Para abordar el problema de clasificación se han utilizado bloques. Un problema importante es decidir su tamaño. Cada muestra o instancia corresponde a un bloque de tamaño 2048x2048 y ha sido clasificado por un anatomopatólogo como cancerígeno o no cancerígeno.

Para cada bloque 2048x2048 hemos calculado el histograma de los rasgos obtenidos tras calcular características LBP uniformes invariantes por rotaciones con radio 1 y número de vecinos igual a 8 sobre cada uno de los píxeles del parche. Por tanto, cada bloque queda resumido por un histograma sobre 10 valores (0 a 9) que cuenta el número de píxeles en el bloque a los que se le asigna la misma etiqueta (un número entre 0 y 9).

Las siguientes imágenes explican cómo una etiqueta de 0 a 9 fue asignada a cada píxel, conocidos sus vecinos. En la figura 2, los puntos blancos corresponden a píxeles con valores mayores que el central y los negros a píxeles con valores menores o iguales. El número en el centro indica el correspondiente código LBP.

Figura 2.

En los gráficos más a la izquierda y derecha de la figura 2 a los dos patrones con 0 transiciones 0-1 le fue asignado o bien el 0 o bien el 8. En la misma figura, a los distintos patrones (y sus rotados) que contaban con 2 transiciones les fueron asignadas etiquetas desde 1 hasta 7. Al resto de patrones (todos tienen más de 2 transiciones) les fue asignada la etiqueta 9, ver figura 3:

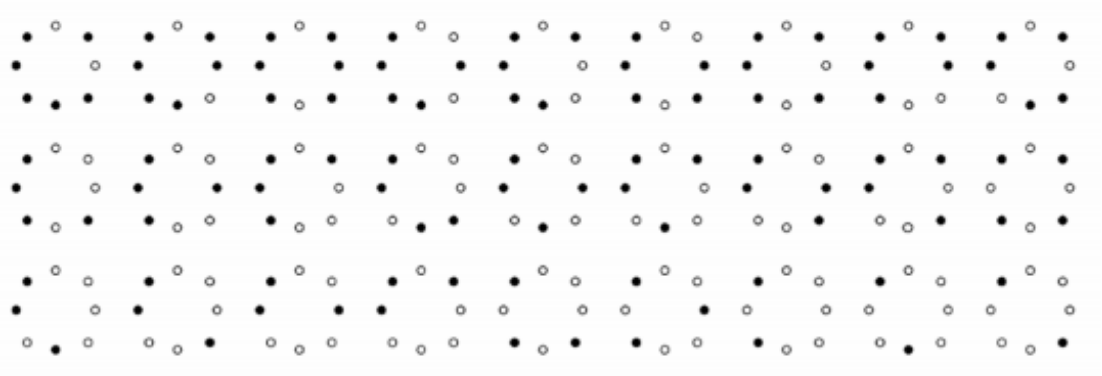
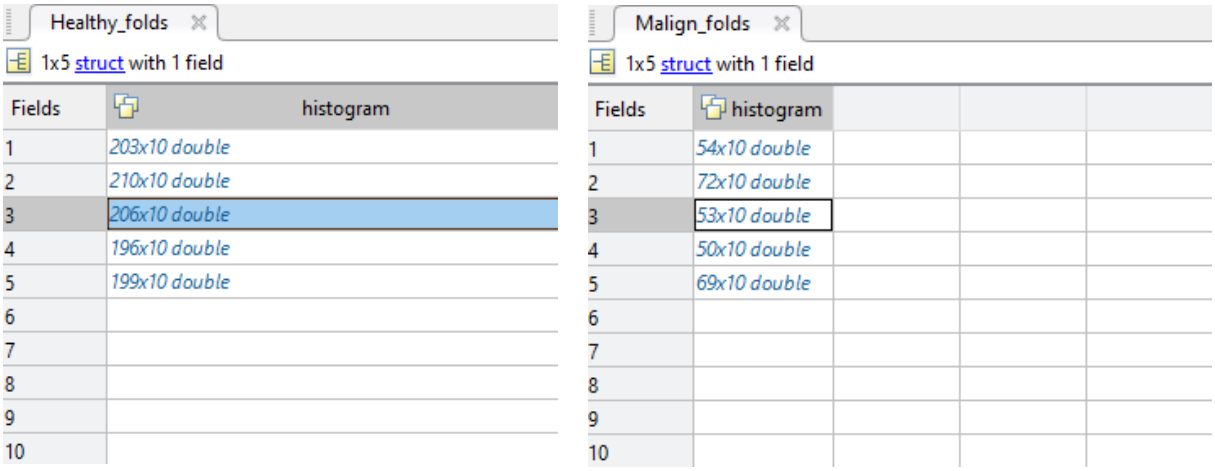


Figura 3.

En el fichero Datos.mat se proporciona un total de 1312 instancias, cada una de ellas corresponde a un bloque de tejido histopatológico de próstata con tamaño 2048x2048. De estas instancias, 1014 proceden de tejido sano (clase 0) y el resto, 298, de tejido cancerígeno (clase 1). **El problema está, por tanto, altamente desbalanceado.**

Con el objetivo de hacer una validación cruzada con 5 carpetas (*folds)*, los bloques sanos y cancerígenos fueron distribuidos en 5 conjuntos disjuntos, que han sido guardados en las estructuras

`Healthy_folds` y `Malign_folds`, respectivamente. Haciendo doble clic en dichos objetos se debe ver la siguiente estructura:



Healthy_folds

1x5 struct with 1 field

Fields	histogram
1	203x10 double
2	210x10 double
3	206x10 double
4	196x10 double
5	199x10 double
6	
7	
8	
9	
10	

Malign_folds

1x5 struct with 1 field

Fields	histogram
1	54x10 double
2	72x10 double
3	53x10 double
4	50x10 double
5	69x10 double
6	
7	
8	
9	
10	

La forma de acceder a los datos de cada partición `i=1,…,5` es:

- `Healthy_folds(i).histogram`
- `Malign_folds(i).histogram`

Para un fold k (k=1,…,5), la forma de construir el conjunto de entrenamiento y test es la siguiente:

- El conjunto de test estará compuesto por los datos de `Healthy_folds(k).histogram` y `Malign_folds(k).histogram`.
- El de entrenamiento estará formado por los datos en `Healthy_folds(i).histogram` y `Malign_folds(i).histogram` para i distinto de k debidamente concatenados (uno bajo otro).

Muy importante, como el conjunto de entrenamiento está altamente desbalanceado (el número de casos negativos –no cáncer- es aproximadamente cuatro veces el de positivos –cáncer-), para cada *fold* hay que construir cuatro clasificadores GP que enfrenten las instancias positivas en un *fold* con cuatro subconjuntos disjuntos de las negativas de dicho *fold*. Estos cuatro subconjuntos serán de aproximadamente el mismo tamaño y deben cubrir todo el conjunto de instancias en el *fold*. Con un ejemplo, para fold 1, las instancias de entrenamiento son: sanas (206, 210, 196, 199) y malignas (72, 53, 50, 69) y de test 203 (sanas) y 54 (malignas), respectivamente.

Comprueba que tus *folds* tienen las siguientes dimensiones:

	Fold 1	Fold 2	Fold 3	Fold 4	Fold 5
Tamaño-test	(203+54)x10	(210+72)x10	(206+53)x10	(196+50)x10	(199+69)x10
Tamaño-train	1055x10	1030x10	1053x10	1066x10	1044x10

Cada partición, Fold1 a Fold 5, tiene, como cabría esperar, 1312 instancias.

Utilizar cualquier software que implemente el uso de GP para clasificación usando la función sigmoide para construir el clasificador. Los siguientes paquetes pueden ser de utilidad:

- Para MATLAB (quizás el más antiguo, pero tiene los métodos básicos necesarios): *GPML*. Enlace: http://www.gaussianprocess.org/gpml/code/matlab/doc/
- Para Python (sin TensorFlow, desarrollado por el grupo de Neil Lawrence): *GPy*. Enlace: http://sheffieldml.github.io/GPy/
- Para Python (con TensorFlow, el más potente, aunque también tiene los métodos básicos): *GPflow*. Enlace: https://github.com/GPflow/GPflow

Hay que tener en cuenta que los rasgos no están normalizados, y deben ser normalizarlos.

Uso de GPML para realizar la práctica

Si se usa el código en GPML en Matlab las siguientes líneas son de utilidad:

Un GP es una colección de variables aleatorias, cada número finito de las cuales tienen una distribución conjunta Gaussiana. Para definir el proceso Gaussiano basta con especificar dicha distribución Gaussiana a través de la función media y covarianza. Estas funciones se especifican de forma separada. Habrá que indicar la forma de dichas funciones y los parámetros de los que dependen, llamados hiperparámetros, que deberán ser aprendidos.

- En el fichero meanFunctions.m hay numerosas funciones disponibles para la media. Habitualmente, se supone que la media es igual a cero, por lo que bastará con que definas meanfunc=@meanZero.
- En el fichero covFunctions.m se dispone de cantidad de funciones para definir la matriz de covarianza. Puede ser de especial utilidad la función @covSEiso que conocemos como función de base radial o núcleo Gaussiano y que frecuentemente recibe el nombre de squared exponential o squared exponentiated. Tal y como vimos en clase, esta función depende de dos parámetros, habitualmente llamados varianza y escala, que en este paquete son denotados por sf y ell, respectivamente. Estos parámetros tienen que ser estimados durante la fase de aprendizaje (training). Los podemos inicializar usando ell=1.9, sf=1.0 y definiendo hyp.cov=log([ell sf]).
- Con estos dos pasos hemos definido la distribución a priori, ahora definiremos el modelo de observación. Vamos a asignar la etiqueta y= 1 a tejido cancerígeno e y=-1 a tejido no cancerígeno. Nuestro modelo de observación es

$$p(y|f) = \left(\frac{1}{1+e^{-f}}\right)^{(1+y)/2} \left(\frac{1}{1+e^{f}}\right)^{(1-y)/2}$$

que es la llamada función sigmoide o asociada a la regresión logística. Especificaremos en el modelo de observación que usamos likfunc=@likLogistic.

- Ya tenemos todos los ingredientes del problema. Tenemos el modelo a priori y el modelo de observación, es decir, $p(y|f)p(f)$. Recuerda que tenemos que estimar los parámetros del modelo ell y sf que aparecen en $p(f)$ resolviendo

$$max_{ell,sf} \int p(y|f)p(f)df$$

  Fíjate que el modelo de observación no añade parámetros a estimar. El aprendizaje de parámetros se realiza con:

  hyp= minimize(hyp, @gp, -40, @infVB, meanfunc, covfunc, likfunc, data, labels)

  donde data será el conjunto de entrenamiento (instancias x características) aproximadamente balanceado y labels será un vector columna con las etiquetas, recuerda, etiqueta y= 1 a tejido cancerígeno e y=-1 a tejido no cancerígeno. La probabilidad de ser cancerígena (positiva), prob_test, para cada instancia de test se obtendrá a partir de los parámetros hyp aprendidos de esta forma:

  [a b c d lp]=gp(hyp, @infVB, meanfunc, covfunc, likfunc, data, labels, data_test, ones(n,1));

  prob_test=exp(lp);

- Cuando quieras utilizar el núcleo lineal @covLIN, https://github.com/trungngv/agp/blob/master/libs/gpml-matlab-v2/covLIN.m, no tendrás que aprender (ni inicializar en consecuencia) los hiperparámetros sf y ell, como ocurre con el gaussiano, https://github.com/guruucsd/matlab-utils/blob/master/web/gpml/cov/covSEiso.m, y bastará con establecer hyp=[ ].

- Recuerda que con las particiones que has hecho en cada *fold*, el procedimiento necesitarás llevarlo a cabo cuatro veces por *fold*. Cuando hayas obtenido la probabilidad media de pertenecer a clase cancerígena para cada instancia de test en el *fold* correspondiente, deberás calcular

  [X1, Y1, T, AUC1] = perfcurve(label_test, probability_mean,1);

  y también

  [X2, Y2, T2pr, AUC2] = perfcurve(targets, scores, 1, 'xCrit', 'sens', 'yCrit', 'prec');

  Entiende que devuelven estas funciones (lo preguntaré en la defensa).

- A continuación, calcularás las predicciones (label_pred_test) fijando una threshold θ entre 0 y 1. Utiliza θ=0.5 y si quieres incluye también otro valor que a ti te parezca más apropiado. Si la probabilidad para una instancia de ser cancerígena es menor o igual a θ, clasificarás la instancia como sana (-1), en caso contrario, como cancerígena (1). Sobre estas predicciones calcularás la matriz de confusión con la función confusionmat:

Confusion=confusionmat(label_test,label_pred_test)

que devolverá la matriz en la forma

	Predicciones	
Etiquetas	TP	FN
	FP	TN

donde P representa a la clase positiva (en nuestro caso a la clase cáncer). Ten cuidado con la salida de confusionmat, que puede que no coincida con la anterior, tienes que tener claro qué es positivo (debe ser cáncer) y negativo (debe ser no cáncer). Puedes especificar el orden con la opción 'Order' https://es.mathworks.com/help/stats/confusionmat.html.

A partir de la matriz obtenida por la función confusionmat, calcula:

accuracy=(TP+TN)/(TP+FN+FP+TN)
specificity=TN/(TN+FP);
sensitivity (recall)=TP/(TP+FN);
precision=TP/(TP+FP);
F_score=(2*precision*sensitivity)/(precision+sensitivity);

Documentación a entregar

Sube al servidor un documento en formato pdf. El nombre del fichero será tus apellidos y nombre seguidos de las iniciales GP. El fichero contendrá el título: GPCNombreApellido y las siguientes secciones:

- **¿Qué es un proceso gaussiano?** (media página, aproximadamente)
  En esta sección incluirás una breve descripción de los Procesos Gaussianos.

- **Software utilizado para la realización de la práctica** (media página, aproximadamente)
  En esta sección describirás qué paquete has usado para la realización de la práctica. Los núcleos utilizados y cualquier información relativa a como se ha realizado la estimación de los parámetros. Usa al menos dos núcleos: lineal y Gaussiano (SE).

- **Resultados experimentales.**
    - **a. Por *fold* debes hacer lo siguiente** (2 páginas, aproximadamente)
        - **i.** Para cada instancia de test en el *fold* debes haber obtenido cuatro probabilidades de que sea cancerígena (una por cada uno de los cuatro GPs). Calcula la media de estas cuatro probabilidades. A partir de ellas, dibuja la curva ROC e indica su área bajo la curva (AUC). Dibuja también la curva Precisión-Recall (PR) e indica también su área bajo la curva.
        - **ii.** Para un umbral 0.5 incluye la matriz de confusión y crea una tabla que contenga los valores de accuracy, specificity, sensitivity (recall), precision y F_score.
        - **iii.** Discute los resultados obtenidos.
    - **b. Para un nuevo dato** (1 página, aproximadamente)
        - **i.** ¿Cómo lo clasificarías?
    - **c. Diseño de experimento adicional (no hay que implementarlo, solo discutirlo)** (1 página, aproximadamente)
        - **i.** En la práctica descrita hemos utilizado bagging para balancear las clases. Tenemos 1014 y 298 ejemplos sanos y cancerígenos, respectivamente. ¿Cómo aumentarías el número de ejemplos positivos para balancear los datos? Una vez balanceados, cómo construirías el clasificador.

La fecha límite de entrega es el 10 de marzo de 2020. La defensa de la práctica se realizará en el despacho del profesor el día 13 de marzo de 2019 en horario que se publicará en la página web de la asignatura.