MOwNiT

March 13, 2024

1 Laboratorium 02

1.1 Metoda najmniejszych kwadratów

Iga Antonik, Helena Szczepanowska

2 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 i wykres wybranej kolumny danych przy pomocy funkcji hist oraz plot. 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 kolumnradius (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 należy rozwiązać stosując równanie normalne (tj. nie używając funkcji scipy.linalg.lstsq). Rozwiązując równanie normalne należy użyć funkcji solve, unikając obliczania odwrotności macierzy funkcją scipy.linalg.pinv.

- (f) Oblicz współczynniki uwarunkowania macierzy, cond(AT A), dla liniowej i kwadratowej metody najmniejszych kwadratów.
- (g) 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]   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]   0).

Oblicz liczbę fałszywie dodatnich (ang. false-positives) oraz fałszywie ujemnych (ang. false-negatives) przypadków dla obu reprezentacji. Przypadek fałszywie dodatni zachodzi, kiedy model przewiduje nowotwór złośliwy, gdy w rzeczywistości nowotwór był łagodny. Przypadek fałszywie ujemny za- chodzi, kiedy model przewiduje nowotwór łagodny, gdy w rzeczywistości nowotwór był złośliwy.

2.1 Rozwiązanie

2.1.1 Biblioteki

Korzystam z biblioteki NumPy ze względu na jej zalety w pracy z wielowymiarowymi tablicami danych oraz operacjami numerycznymi. Używam także biblioteki Pandas, która umożliwia efektywną pracę z danymi w postaci tabelarycznej. Do rysowania wykresów wykorzystuję bibliotekę matplotlib.

[ ]:
```
import pandas as pd
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy.linalg import solve, cond
```

Wczytanie nazw kolumn z pliku

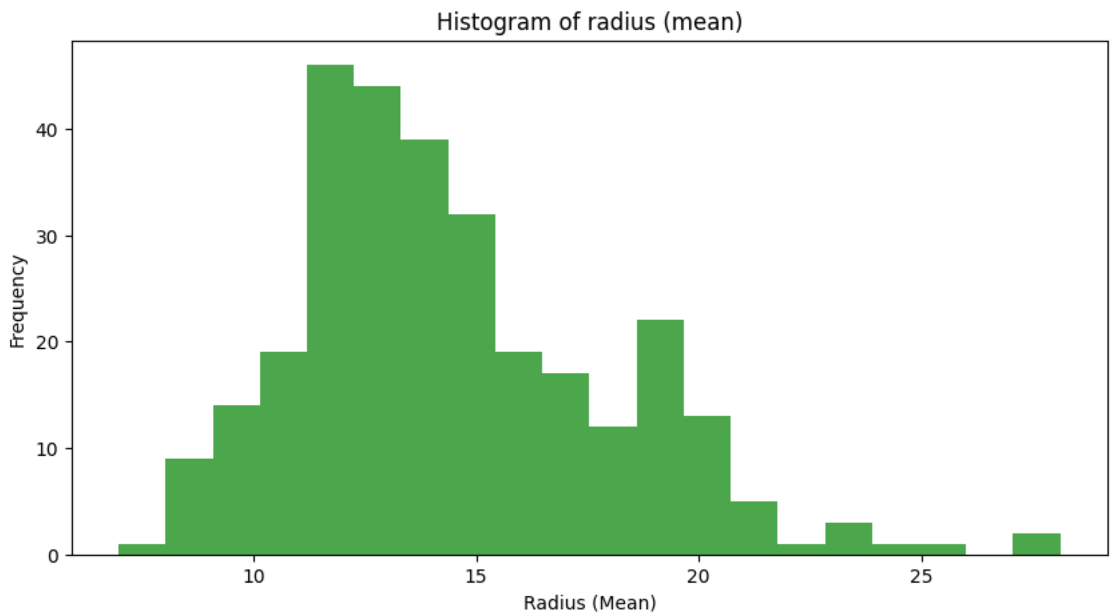
[ ]:
```
labels_path = './breast-cancer.labels'
with open(labels_path, 'r') as file:
    column_names = file.read().splitlines()
```

Wczytanie zbiorów danych

[ ]:
```
train_data_path = './breast-cancer-train.dat'
validate_data_path = './breast-cancer-validate.dat'
train_data = pd.io.parsers.read_csv(train_data_path, header=None, names=column_names)
validate_data = pd.io.parsers.read_csv(validate_data_path, header=None, names=column_names)
```

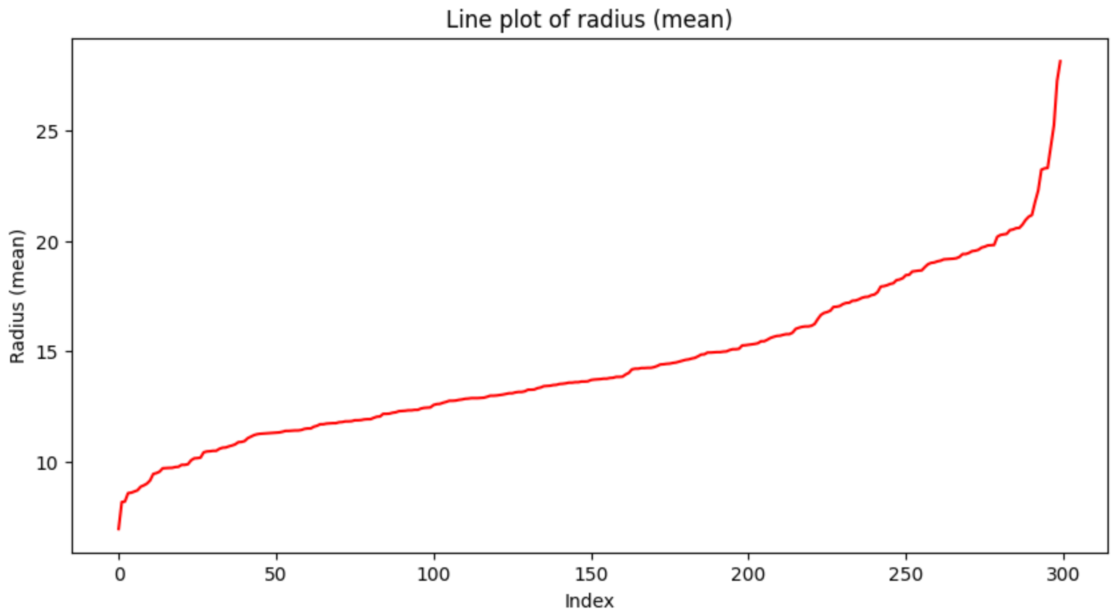
2.1.2 Histogram dla kolumny 'radius (mean)'

[ ]:
```
plt.figure(figsize=(10, 5))
plt.hist(train_data['radius (mean)'], bins=20, color='green', alpha=0.7)
plt.title('Histogram of radius (mean)')
plt.xlabel('Radius (Mean)')
plt.ylabel('Frequency')
plt.show()
```



2.1.3 Wykres liniowy dla kolumny 'radius (mean)'

[ ]:
```
plt.figure(figsize=(10, 5))
plt.plot(train_data['radius (mean)'].sort_values().reset_index(drop=True),␣
  ↪color='red')
plt.title('Line plot of radius (mean)')
plt.xlabel('Index')
plt.ylabel('Radius (mean)')
plt.show()
```



Na wykresach mozemy zaobserwowac, ze zdecydowana wiekszosc pacjentów posiada guza, którego średnica jest między 10 a 20. Wykres liniowy został narysowany dla rosnących wartości średnicy aby lepiej mozna było zaobserwować tendencję wielkości.

2.1.4 Przygotowanie macierzy dla metod liniowej i kwadratowej

Dla metody liniowej macierz wygląda następująco:

$$A_{\text{lin}} = \begin{bmatrix} f_{1,1} & f_{1,2} & f_{1,3} & f_{1,4} \\ f_{2,1} & f_{2,2} & f_{2,3} & f_{2,4} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{n,1} & f_{n,2} & f_{n,3} & f_{n,4} \end{bmatrix}$$

A dla kwadratowej:

$$A_{\text{quad}} = \begin{bmatrix} f_{1,1}, f_{1,2}, f_{1,3}, f_{1,4}, f_{1,1}^2, f_{1,2}^2, f_{1,3}^2, f_{1,4}^2, f_{1,1}f_{1,2}, f_{1,1}f_{1,3}, f_{1,1}f_{1,4}, f_{1,2}f_{1,3}, f_{1,2}f_{1,4}, f_{1,3}f_{1,4} \\ \vdots \\ f_{n,0}, f_{n,1}, f_{n,2}, f_{n,3}, f_{n,0}^2, f_{n,1}^2, f_{n,3}^2, f_{n,4}^2, f_{n,1}f_{n,2}, f_{n,1}f_{n,3}, f_{n,1}f_{n,4}, f_{n,2}f_{n,3}, f_{n,2}f_{n,4}, f_{n,3}f_{n,4} \end{bmatrix}$$

[ ]:
```
columns_quadratic = ['radius (mean)', 'perimeter (mean)', 'area (mean)',
    'symmetry (mean)']
cq = columns_quadratic
```

```python
A_train_linear = np.matrix(train_data.iloc[:, 2:])
A_validate_linear = np.matrix(validate_data.iloc[:, 2:])

train_quadratic = train_data[columns_quadratic]
validate_quadratic = validate_data[columns_quadratic]

quadratic_square =  np.square(train_quadratic)
quadratic_product = pd.concat([train_quadratic[cq[0]]*train_quadratic[cq[1]], train_quadratic[cq[0]]*train_quadratic[cq[2]],
                              train_quadratic[cq[0]]*train_quadratic[cq[3]], train_quadratic[cq[1]]*train_quadratic[cq[2]],
                              train_quadratic[cq[1]]*train_quadratic[cq[3]], train_quadratic[cq[2]]*train_quadratic[cq[3]]], axis = 1)

A_train_quadratic = np.concatenate((train_quadratic, quadratic_square, quadratic_product), axis = 1)

validate_square =  np.square(validate_quadratic)
validate_product = pd.concat([validate_quadratic[cq[0]]*validate_quadratic[cq[1]], validate_quadratic[cq[0]]*validate_quadratic[cq[2]],
                              validate_quadratic[cq[0]]*validate_quadratic[cq[3]], validate_quadratic[cq[1]]*validate_quadratic[cq[2]],
                              validate_quadratic[cq[1]]*validate_quadratic[cq[3]], validate_quadratic[cq[2]]*validate_quadratic[cq[3]]], axis = 1)

A_validate_quadratic = np.concatenate((validate_quadratic, validate_square, validate_product), axis = 1)
```

2.1.5 Stworzenie wektorów b

[ ]:
```python
b_train = np.where(train_data['Malignant/Benign'] == 'M', 1, -1)
b_validate = np.where(validate_data['Malignant/Benign'] == 'M', 1, -1)
```

2.1.6 Znalezienie wag metodą najmniejszych kwadratów

$$w = (A^T A)^{-1} A^T b$$

```
[ ]: weights_linear = solve(A_train_linear.T @ A_train_linear, A_train_linear.T @␣
      ↪b_train[:, np.newaxis]).flat
     weights_quadratic = solve(A_train_quadratic.T @ A_train_quadratic,␣
      ↪A_train_quadratic.T @ b_train[:, np.newaxis]).flat
```

2.1.7 Obliczenie współczynników uwarunkowania macierzy

```
[ ]: cond_linear = cond(A_train_linear.T @ A_train_linear)
     cond_quadratic = cond(A_train_quadratic.T @ A_train_quadratic)

     print("cond_linear: ",cond_linear, "\n cond_quadratic: ",cond_quadratic)
```

```
cond_linear:  1809248222566.8225
 cond_quadratic:  9.056816948763561e+17
```

2.1.8 Obliczenie fałszywie dodatnich oraz fałszywie ujemnych przypadków

```
[ ]: p_linear = A_validate_linear @ weights_linear
     p_quadratic = A_validate_quadratic @ weights_quadratic

     predictions_linear = np.where(p_linear > 0, 1, -1)
     predictions_quadratic = np.where(p_quadratic > 0, 1, -1)

     fp_linear = np.sum((predictions_linear == 1) & (b_validate == -1))
     fn_linear = np.sum((predictions_linear == -1) & (b_validate == 1))
     fp_quadratic = np.sum((predictions_quadratic == 1) & (b_validate == -1))
     fn_quadratic = np.sum((predictions_quadratic == -1) & (b_validate == 1))

     print("Linear \n False Positive:", fp_linear, "\n False Negative:", fn_linear)
     print("Quadratic \n False Positive:", fp_quadratic, "\n False Negative:",␣
      ↪fn_quadratic)
```

```
Linear
 False Positive: 6
 False Negative: 2
Quadratic
 False Positive: 15
 False Negative: 5
```

2.2 Wnioski

Jak mozna zauwazyc waga oraz macierz otrzymane przy pomocy liniowej metody najmniejszych kwadratów dały mniej zarówno fałszywie pozytywnych jak i fałszywie negatywnych wyników niz metoda kwadratowa. Moze to wynikac z faktu, ze do macierzy tworzonej dla metody kwadratowej przekazalismy mniej danych.

Współczynnik uwarunkowania macierzy dla liniowej reprezentacji jest równiez o wiele mniejszy od współczynnika wyliczonego dla reprezentacji kwadratowej. Oznacza to, ze w większym stopniu błąd reprezentacji numerycznej danych wejściowych wpływa na błąd wyniku w reprezentacji kwadratowej.

Podsumowując, przeprowadzona analiza pokazuje, ze ilość przekazanych do modelu danych oraz wybór metody jaką będziemy te dane analizać ma kluczowy wpływ na wyniki jakie otrzymamy. Zadna z uzytych metod nie dała idealnych wyników, ale metoda liniowa najmniejszych kwadratów sprawdziła się lepiej.

2.3 Bibliografia

http://heath.cs.illinois.edu/scicomp/notes/cs450_chapt03.pdf

https://numpy.org/doc/stable/reference/generated/numpy.linalg.solve.html

prezentacja Least squares metod Marcin Kuta