Universidade Federal do Rio de Janeiro

Inteligência Computacional

Breast Cancer Wisconsin

Nomes:
Aramys Almeida Matos
Luís Gustavo Oliveira Silva

Professor:
Alexandre Evsukoff

1 Introdução

Este trabalho será desenvolvido sobre o *dataset Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic)*. Este *dataset* possui como variáveis características computadas a partir de imagens digitalizadas de exames de mama por punção aspirativa por agulha fina. Os dados descrevem características do núcleo das células presentes na imagem.

2 Caracterização

2.1 Dados

Inicialmente é importante ressaltar que o conjunto de dados gerado pelos exames é tridimensional. Para cada registro (paciente) existe um conjunto de células, cada uma com os seguintes atributos.

1. Raio (média das distâncias do centro para pontos no perímetro)
2. Textura
3. Perímetro
4. Área
5. Suavidade
6. Compacidade
7. Concavidade
8. Pontos côncavos
9. Simetria
10. Dimensão Fractal

De forma a eliminar a terceira dimensão (do conjunto de células), para cada conjunto de células o *UCI Machine Learning* forneceu o dataset com valores de média, desvio(erro) padrão e o pior valor dos atributos no universo das células, resultando em 30 variáveis de entrada. O dataset conforme obtido possui as variáveis como segue:

- radius_mean
- texture_mean
- perimeter_mean
- area_mean
- smoothness_mean
- compactness_mean
- concavity_mean
- concave points_mean
- symmetry_mean
- fractal_dimension_mean
- radius_se
- texture_se
- perimeter_se
- area_se
- smoothness_se
- compactness_se
- concavity_se
- concave points_se
- symmetry_se
- fractal_dimension_se
- radius_worst

- texture_worst
- perimeter_worst
- area_worst
- smoothness_worst
- compactness_worst
- concavity_worst
- concave points_worst
- symmetry_worst
- fractal_dimension_worst

A variável de saída é o diagnóstico (maligno ou benigno codificados como -1 e 1 respectivamente). Existe uma coluna com o ID do paciente que será eliminada ser irrelevante. O dataset apresenta 357 amostras benignas e 212 amostras malignas.

2.2 Estatísticas Básicas e Histogramas

- Radius

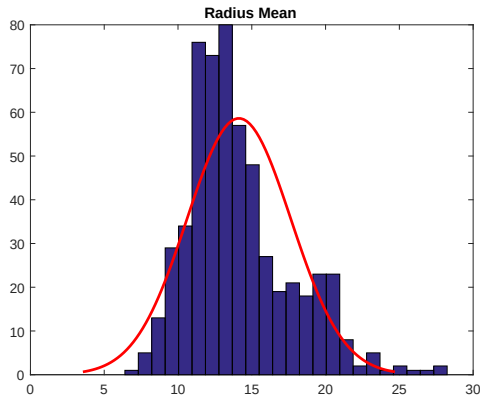


Figura 1: Mean

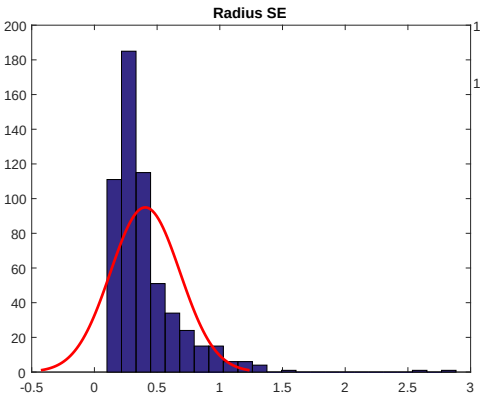


Figura 2: Standard Error

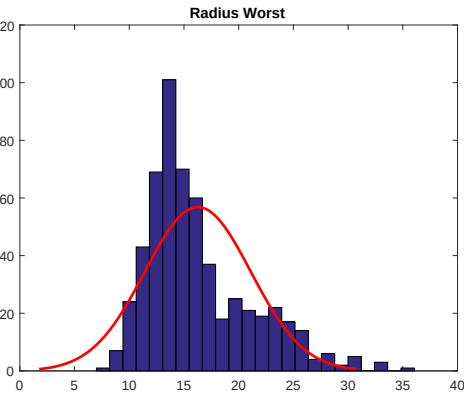


Figura 3: Worst

Tabela 1: Radius

	radius_mean	radius_se	radius_worst
Máximo	28.11	2.873	36.04
Mínimo	6.981	0.1115	7.93
Média	14.12729	0.405172	16.26919
Desvio padrão	3.524049	0.277313	4.833242
Percentil 25	11.7	0.2324	13.01
Percentil 50	13.37	0.3242	14.97
Percentil 75	15.78	0.4789	18.79

Análise: Para a variável Radius mean, vemos que a maioria de seus valores se concentram mais proximos da média que é 14,13. Para Radius Standard Error, também têm um coportamento semelhante a uma função de cauda longa, porém não temos a presença de valores no intervalo entre 1,6 e 2,4. Já para a variável Radius Worst, tem um comportamento semelhante à variável Radius mean.

- Texture

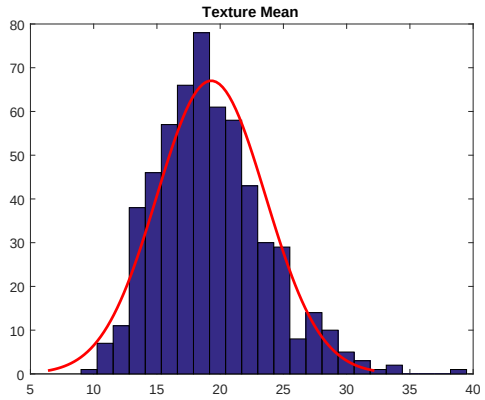


Figura 4: Mean

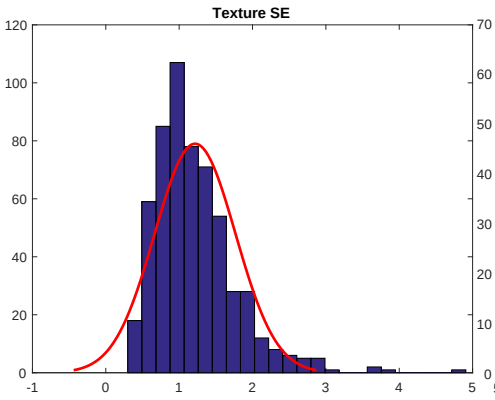


Figura 5: Standard Error

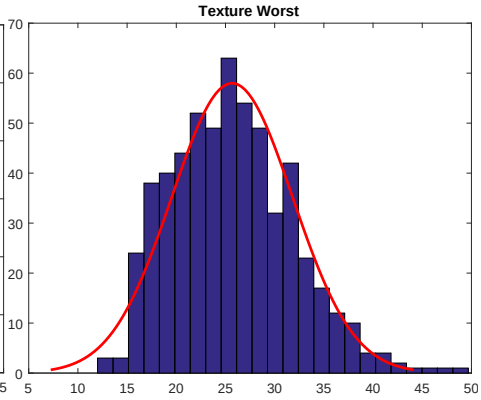


Figura 6: Worst

Tabela 2: Texture

	texture_mean	texture_se	texture_worst
Máximo	39.28	4.885	49.54
Mínimo	9.71	0.3602	12.02
Média	19.28964851	1.216853427	25.67722
Desvio padrão	4.301035768	0.551648393	6.146258
Percentil 25	16.17	0.8339	21.08
Percentil 50	18.84	1.108	25.41
Percentil 75	21.8	1.474	29.72

Análise: Podemos perceber que a variável Texture Mean, tem um comportamento que lembra a uma função Gaussiana, que de certa forma é espelhada em realação a média, com a exceção dos outliers. Em Texture Standart Error, a média é 1,22 e seus valores estão localizados proóximos á média, porém temos uma certa quantidade de valores distantes, mesmo considerando o desvio parão, e um valor máximo muito alto. Em Texture Worst, vemos que seu comportamento se assemelha a Texture Mean.

- Perimeter

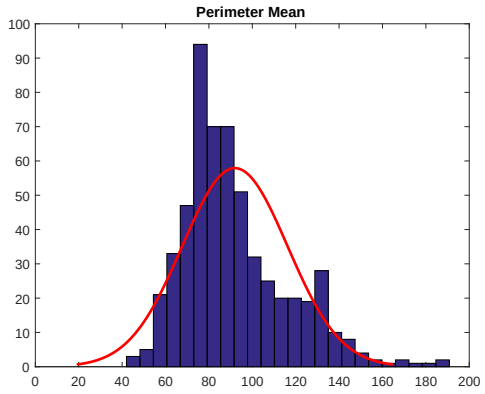


Figura 7: Mean

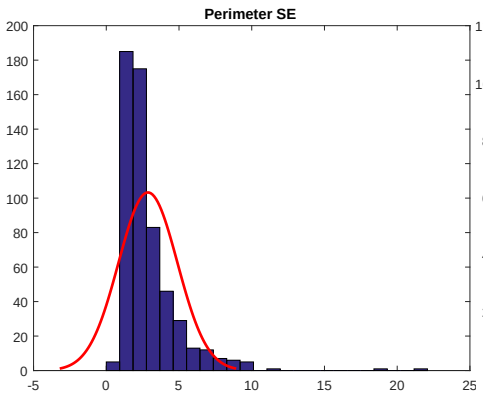


Figura 8: Standard Error

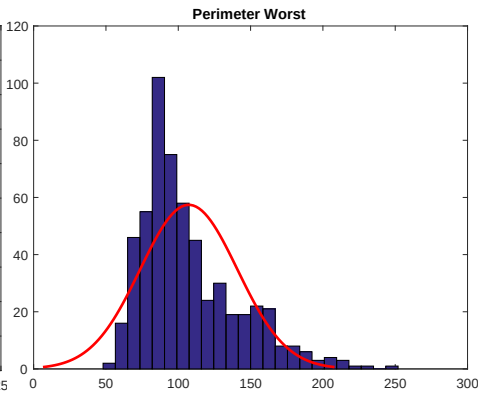


Figura 9: Worst

Tabela 3: Perimeter

	perimeter_mean	perimeter_se	perimeter_worst
Máximo	188.5	21.98	251.2
Mínimo	43.79	0.757	50.41
Média	91.96903339	2.866059227	107.2612
Desvio padrão	24.29898104	2.021854554	33.60254
Percentil 25	75.17	1.606	84.11
Percentil 50	86.24	2.287	97.66
Percentil 75	104.1	3.357	125.4

Análise: Em Perimeter Standard Error, vemos a presença de outliers, como por exemplo o valor máximo que é 21,98, enquanto sua média é 2.87. E em Perimeter Worst, vemos que possui um desvio padrão alto e seus valores estão distribuídos de forma distante da média.

- Area

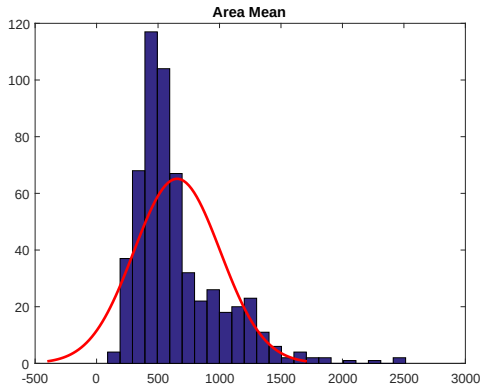


Figura 10: Mean

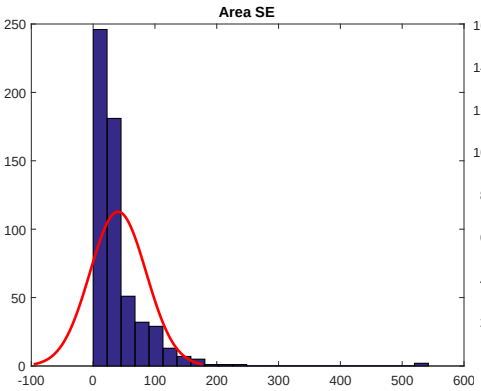


Figura 11: Standard Error

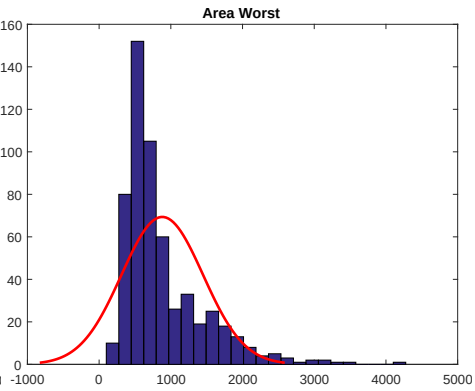


Figura 12: Worst

Tabela 4: Area

	area_mean	area_se	area_worst
Máximo	2501	542.2	4254
Mínimo	143.5	6.802	185.2
Média	654.8891037	40.33707909	880.5831283
Desvio padrão	351.9141292	45.49100552	569.3569927
Percentil 25	420.3	17.85	515.3
Percentil 50	551.1	24.53	686.5
Percentil 75	782.7	45.19	1084

Análise: Na variável Area Mean, vemos que ela possui um desvio padrão grande, sendo maior que a metade da média, assim como em Area Worst. Em Area Standard Error, vemos que a variável tem um compartamento semelhante a uma função de cauda longa e temos uma valor bem distante que é o valor máximo (2501,00).

- Smoothness

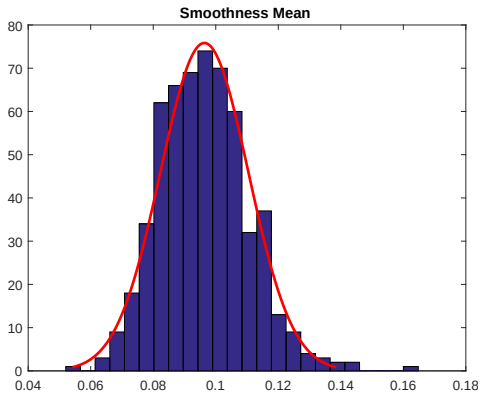


Figura 13: Mean

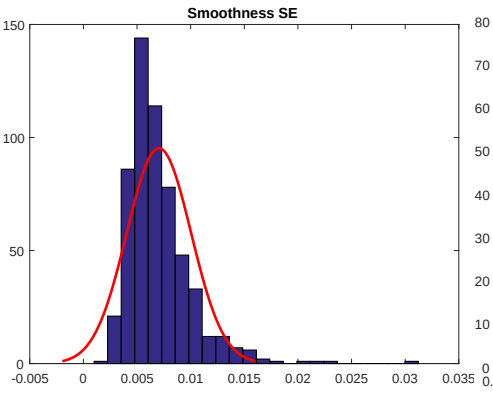


Figura 14: Standard Error

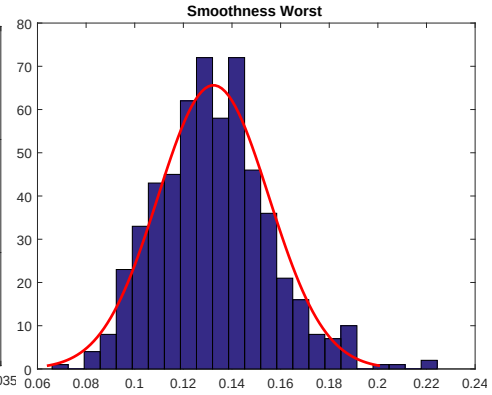


Figura 15: Worst

Tabela 5: Smoothness

	smoothness_mean	smoothness_se	smoothness_worst
Máximo	0.1634	0.03113	0.2226
Mínimo	0.05263	0.001713	0.07117
Média	0.096360281	0.007040979	0.132368594
Desvio padrão	0.014064128	0.003002518	0.022832429
Percentil 25	0.08637	0.005169	0.1166
Percentil 50	0.09587	0.00638	0.1313
Percentil 75	0.1053	0.008146	0.146

Análise: Podemos ver que tanto Smoothness Mean quanto em Worst, elas tem uma aparência semelhante a uma função Gaussiana e possuem um desvio padrão pequeno, já em Smoothness Standard Error, vemos que ela possui um desvio padrão alto e existe a presença de outliers como o seu valor máximo (0,16340).

- Compactness

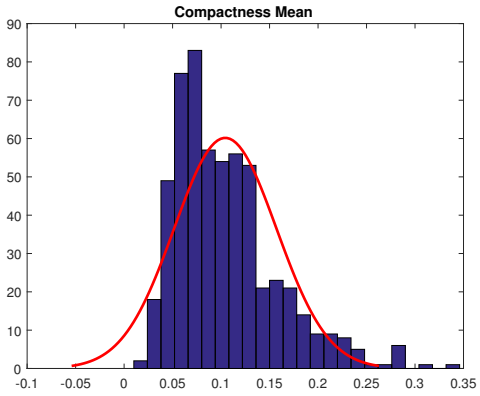


Figura 16: Mean

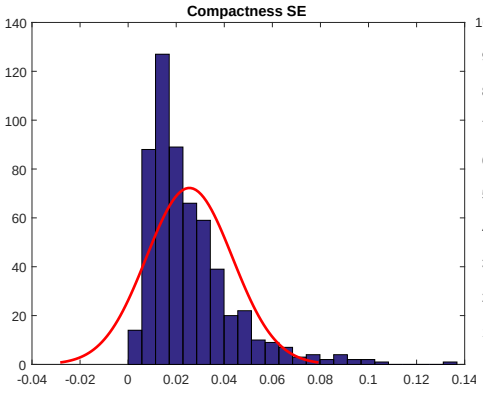


Figura 17: Standard Error

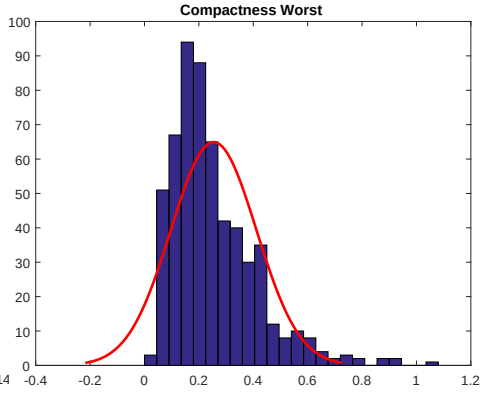


Figura 18: Worst

Tabela 6: Compactness

	compactness_mean	compactness_se	compactness_worst
Máximo	0.3454	0.1354	1.058
Mínimo	0.01938	0.002252	0.02729
Média	0.104340984	0.025478139	0.254265
Desvio padrão	0.052812758	0.017908179	0.157336
Percentil 25	0.06492	0.01308	0.1472
Percentil 50	0.09263	0.02045	0.2119
Percentil 75	0.1304	0.03245	0.3391

Análise: Aqui percebemos que as 3 variáveis possuem um desvio padrão alto e seus valores máximos se destoam bantante.

- Concavity

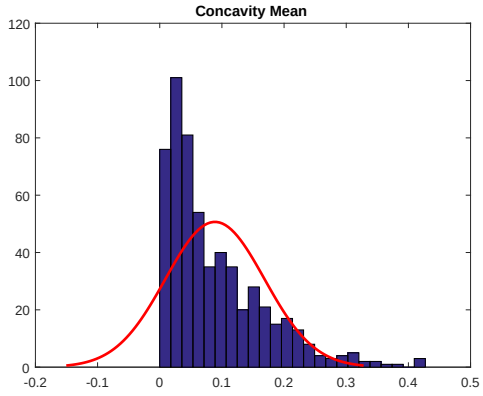


Figura 19: Mean

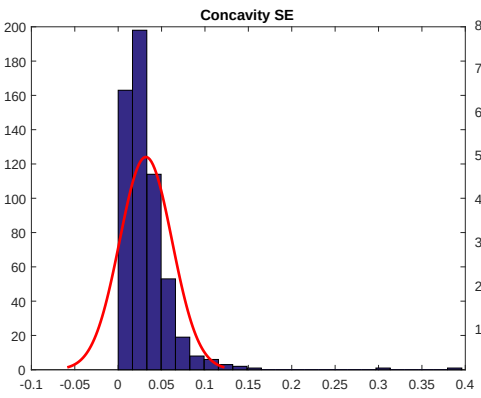


Figura 20: Standard Error

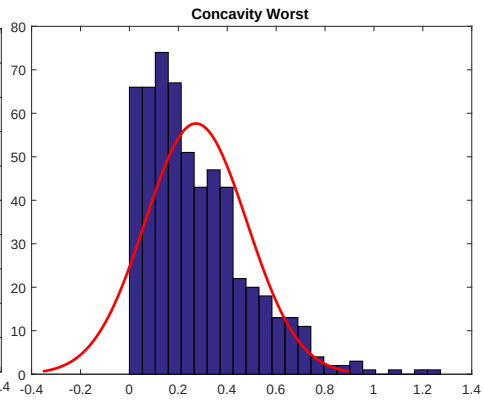


Figura 21: Worst

Tabela 7: Concavity

	concavity_mean	concavity_se	concavity_worst
Máximo	0.4268	0.396	1.252
Mínimo	0	0	0
Média	0.088799316	0.031893716	0.272188483
Desvio padrão	0.079719809	0.03018606	0.208624281
Percentil 25	0.02956	0.01509	0.1145
Percentil 50	0.06154	0.02589	0.2267
Percentil 75	0.1307	0.04205	0.3829

Análise: Nas 3 variáveis percebemos que o seus valores se concentram mais proximos de 0 e a ocorrência desses valores vão decaindo conforme se afastam de 0.

- Concave points

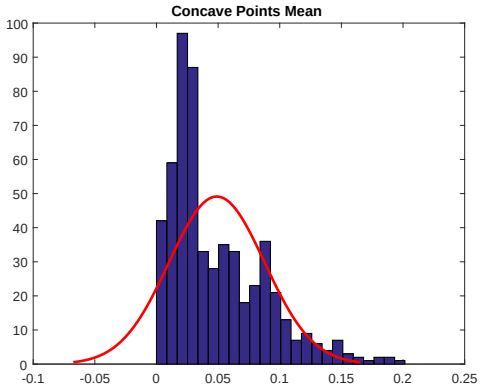


Figura 22: Mean

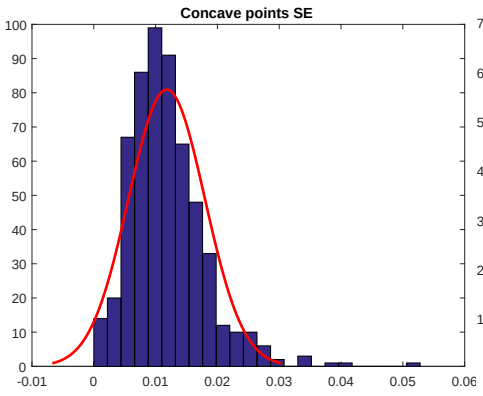


Figura 23: Standard Error

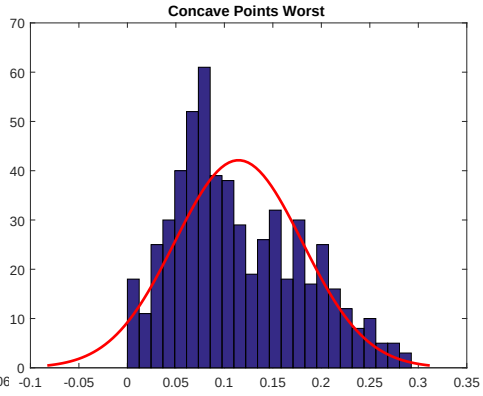


Figura 24: Worst

Tabela 8: Concave points

	concave points_mean	concave points_se	concave points_worst
Máximo	0.2012	0.05279	0.291
Mínimo	0	0	0
Média	0.048919146	0.011796	0.114606
Desvio padrão	0.038802845	0.00617	0.065732
Percentil 25	0.02031	0.007638	0.06493
Percentil 50	0.0335	0.01093	0.09993
Percentil 75	0.074	0.01471	0.1614

Análise: Aqui vemos que a variável Cancave points mean, tem um comportamento semelhante à uma função de cauda longa e que a variável Cancave Points Standard Error possui alguns outliers, como o valor máximo por exemplo.

- Symmetry

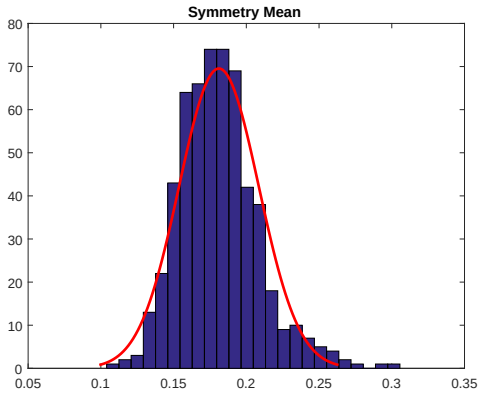


Figura 25: Mean

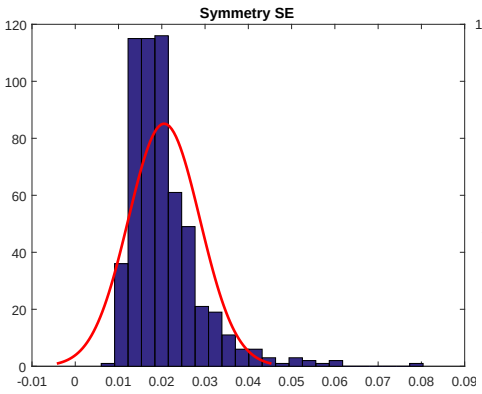


Figura 26: Standard Error

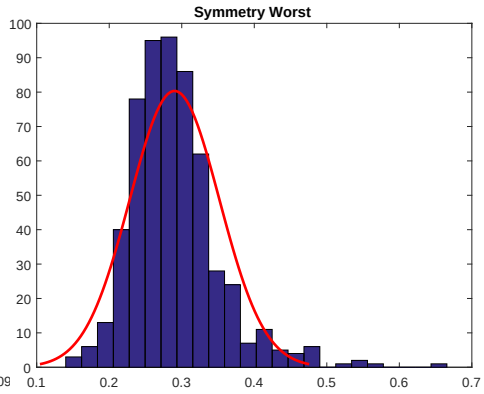


Figura 27: Worst

Tabela 9: Symmetry

	symmetry_mean	symmetry_se	symmetry_worst
Máximo	0.304	0.07895	0.6638
Mínimo	0.106	0.007882	0.1565
Média	0.181162	0.020542	0.290076
Desvio padrão	0.027414	0.008266	0.061867
Percentil 25	0.1619	0.01516	0.2504
Percentil 50	0.1792	0.01873	0.2822
Percentil 75	0.1957	0.02348	0.3179

Análise - A variável Symmetry mean possui um comportamento semelhante a uma função Gaussiana e tanto Symmetry Standard Error, quanto Wosrt possuem valores máximos distantes da média.

- Fractal Dimension

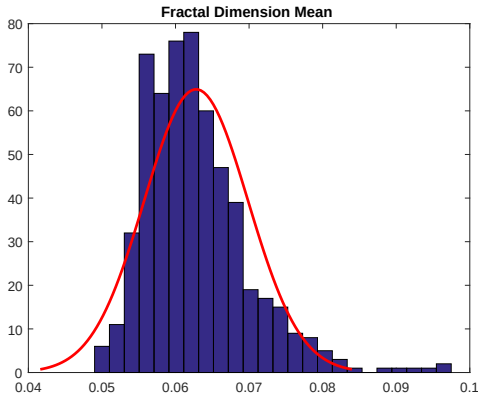


Figura 28: Mean

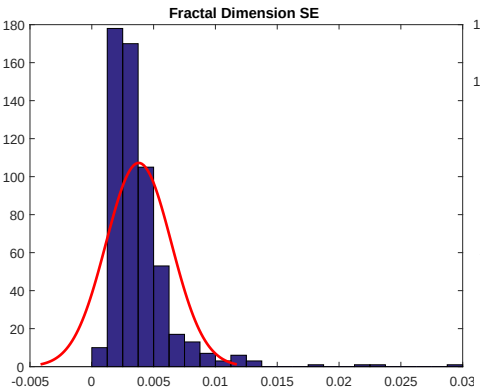


Figura 29: Standard Error

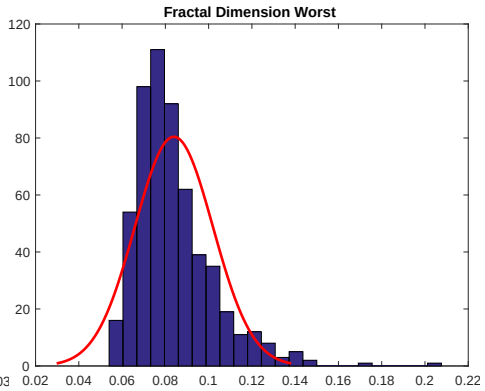


Figura 30: Worst

Tabela 10: Fractal dimension

	fractal_dimension_mean	fractal_dimension_se	fractal_dimension_worst
Máximo	0.09744	0.02984	0.2075
Mínimo	0.04996	0.000895	0.05504
Média	0.06279761	0.003795	0.083945817
Desvio padrão	0.007060363	0.002646	0.018061267
Percentil 25	0.0577	0.002248	0.07146
Percentil 50	0.06154	0.003187	0.08004
Percentil 75	0.06612	0.004558	0.09208

Análise: Podemos ver que apartir da média, a ocorrência dos valores das váreiaveis vão diminuindo conforme se distanciam da média.

A partir dos histogramas podemos avaliar que em geral não revelou características indesejáveis como distribuições multimodais. Conforme comentado algumas apresentaram assimetria.

2.3 Matriz de Correlação

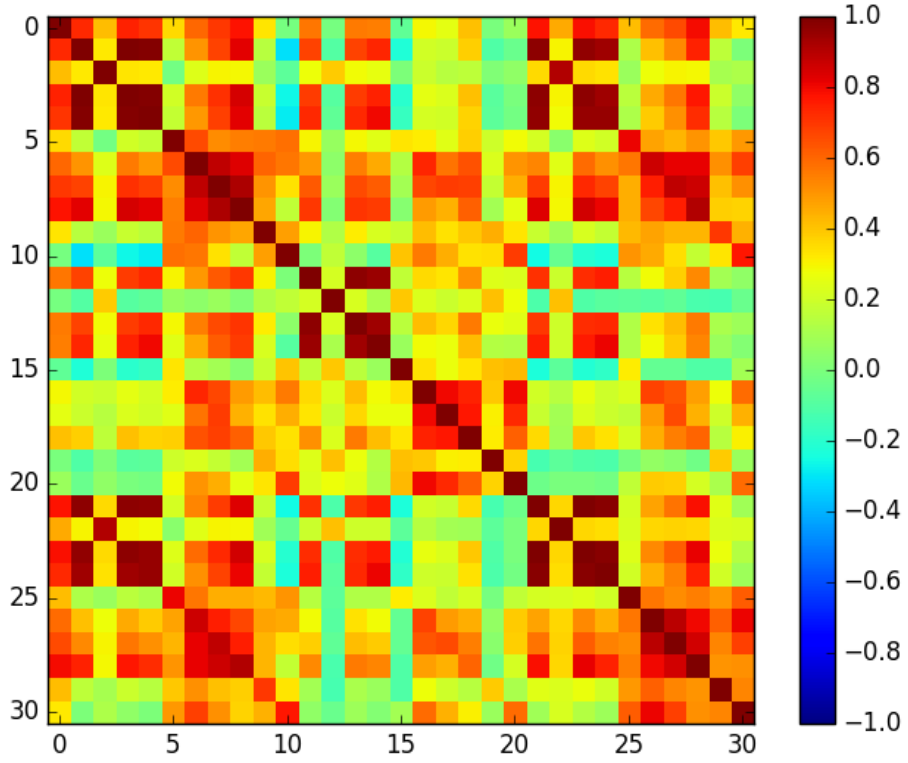


Figura 31: Matriz de Correlação

A partir da matriz podemos concluir que as seguintes variáveis estão fortemente correlacionadas (apresentam coeficiente de correlação acima de 0.9):

- Radius Mean, Perimeter Mean
- Radius Mean, Area Mean
- Radius Mean, Radius Worst
- Radius Mean, Perimeter Worst
- Radius Mean, Area Worst
- Texture Mean, Texture Worst
- Perimeter Mean, Area Mean
- Perimeter Mean, Radius Worst
- Perimeter Mean, Perimeter Worst
- Perimeter Mean, Area Worst
- Area Mean, Radius Worst
- Area Mean, Perimeter Worst
- Area Mean, Area Worst
- Concavity Mean, Concave Points Mean
- Concave Points Mean, Concave Points Worst
- Radius SE, Perimeter SE
- Radius SE, Area SE
- Perimeter SE, Area SE
- Radius Worst, Perimeter Worst
- Radius Worst, Area Worst
- Perimeter Worst, Area Worst

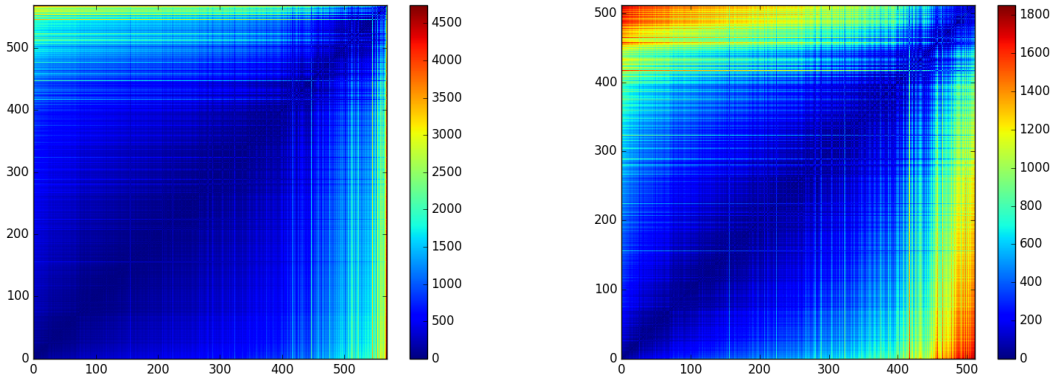
As seguintes variáveis apresentaram correlação negativa:

Variável A	Variável B
compactness_mean	perimeter_mean
radius_se	radius_mean
radius_se	texture_mean
radius_se	perimeter_mean
radius_se	area_mean
radius_se	smoothness_mean
perimeter_se	radius_mean
perimeter_se	texture_mean
perimeter_se	area_mean
perimeter_se	smoothness_mean
compactness_se	radius_mean
compactness_se	texture_mean
compactness_se	perimeter_mean
compactness_se	area_mean
compactness_se	smoothness_mean
fractal_dimension_se	radius_mean
fractal_dimension_se	texture_mean
fractal_dimension_se	perimeter_mean
fractal_dimension_se	area_mean
fractal_dimension_se	smoothness_mean
radius_worst	radius_mean
radius_worst	texture_mean
radius_worst	perimeter_mean
radius_worst	area_mean
radius_worst	smoothness_mean
texture_worst	radius_se
texture_worst	perimeter_se
texture_worst	compactness_se
texture_worst	fractal_dimension_se
perimeter_worst	radius_se
perimeter_worst	compactness_se
perimeter_worst	fractal_dimension_se
area_worst	radius_se
area_worst	compactness_se
area_worst	perimeter_se
area_worst	fractal_dimension_se
smoothness_worst	radius_se
smoothness_worst	compactness_se
smoothness_worst	perimeter_se
smoothness_worst	fractal_dimension_se
compactness_worst	fractal_dimension_se
compactness_worst	perimeter_se
concavity_worst	perimeter_se
concavity_worst	compactness_se
concave points_worst	perimeter_se
concave points_worst	compactness_se
symmetry_worst	perimeter_se
symmetry_worst	compactness_se
symmetry_worst	fractal_dimension_se
fractal_dimension_worst	perimeter_se
fractal_dimension_worst	compactness_se

2.4 Matriz de Distâncias

As figuras 32 e 33 mostram a matriz de distâncias, utilizando a Distância Euclidiana:

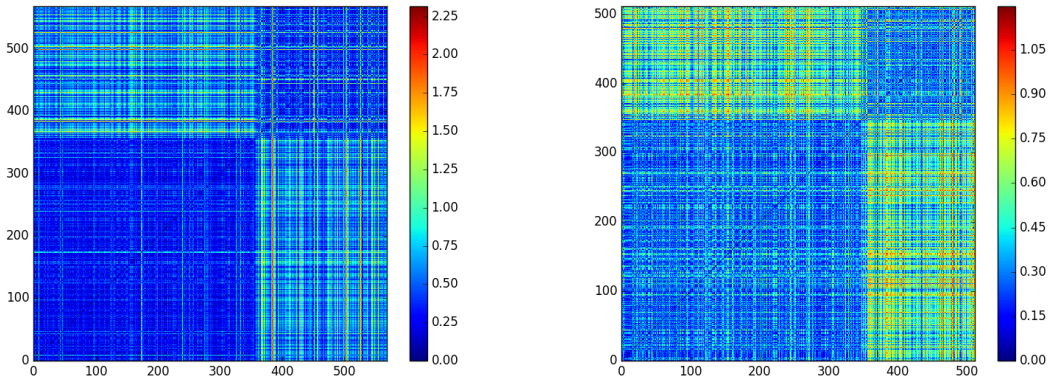
$$dist_E(\nu, \upsilon) = ||\nu - \upsilon||$$



(a) Antes da retirada de outliers (b) Após da retirada de outliers

Figura 32: Matriz de distâncias

A matriz de distâncias para o conjunto de registros original pode ser observada na figura 32a. Foi realizado o processo de retirada de outliers baseado na distância média $m_i = \frac{1}{N}\Sigma_{j=1}^{N} d_{ij}$. Foram removidos os $P_{out} = 10\%$ registros correspondentes aos maiores valores. A matriz de distâncias do conjunto de dados resultante pode ser vista na figura 32b.



(a) Antes da retirada de outliers (b) Após da retirada de outliers

Figura 33: Matriz de distâncias com z-score

Como o conjunto de dados contém variáveis em unidades e escalas diferentes, o que dificulta a avaliação da matriz de distâncias pois os outliers de algumas variáveis acabam dominando. Assim, foi feita uma padronização das variáveis por meio da estimativa z-score e a matriz de distâncias resultante pode ser vista na figura 33.

3 Formulação do Problema

Consiste em um problema de classificação. Deseja-se desenvolver um classificador capaz de predizer a classe do registro (maligno ou benigno).

Para solução deste problema serão aplicados os modelos de classificação a seguir e avaliados os resultados.

- Classificador Bayesiano Simples
- Classificador Bayesiano Quadrático
- Regressão Logística
- Perceptron Múltiplas Camadas

Para os testes a seguinte metodologia será usada. O dataset é dividido em uma razão de 67% dos dados para treinamento e 33% dos dados para teste. Para avaliar o desempenho do classificador, os resultados preditos pelo teste é comparado com os resultados reais e contabilizada a matriz de confusão. A partir dela são calculados as seguintes métricas:

- Acurácia
- Erro global
- Precisão
- Recuperação

4 Apresentação da Tecnologia

Para a implementação e execução dos algoritmos serão usadas as seguintes ferramentas, conforme se mostrarem mais adequadas para a tarefa em questão.

4.1 Python

A linguagem Python apresenta diversas bibliotecas úteis como:

- *SciPy*: Ecossistema de softwares para matemática, ciência e engenharia. Contém os pacotes:
  - *NumPy*
  - *matplotlib*
  - *pandas*: Python Data Analysis Library
- *scikit-learn*: Machine Learning in Python

4.2 Matlab

Possui o seguinte *Toolbox*

- Statistics and Machine Learning Toolbox

5 Classificador Bayesiano Simples

O Classificador Bayesiano baseia-se na aplicação do Teorema de Bayes com a suposição de independência entre cada par de variáveis.

6 Classificador Bayesiano Quadrático

7 Regressão Logística

8 Perceptron

O Perceptron utiliza o modelo McCulloch-Pitts para o neurônio artificial. O processamento de cada unidade é dado por:

$$u(t) = h(z(t)) = h\left(\theta_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i(t)\theta_i\right)$$

onde:

$u(t)$: valor de ativação
$z(t)$: potencial de ativações
h: função de ativação
$x_i(t)$: entradas do neurônio

O Perceptron incorpora o conceito de aprendizado, ou seja, se o padrão é classificado corretamente nenhum ajuste é realizado.

9 Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP)

Uma rede-neural MLP apresenta uma camada de entrada que não realiza processamento, uma ou mais camadas intermediárias que realizam processamento e uma camada de saída que, num problema de classificação é o vetor com as estimativas das variáveis indicadoras. O modelo McCulloch-Pitts é utilizado nas unidades das camadas intermediárias e de saída.

Tabela 11: My caption

Máximo	Mínimo	Média	Desvio Padrão	P 25	P 50	P 75
28.11	6.981	14.13	3.524	11.7	13.37	15.78
2.873	0.1115	0.4052	0.2773	0.2324	0.3242	0.4789
36.04	7.93	16.27	4.833	13.01	14.97	18.79
39.28	9.71	19.29	4.301	16.17	18.84	21.8
4.885	0.3602	1.217	0.5516	0.8339	1.108	1.474
49.54	12.02	25.68	6.146	21.08	25.41	29.72
188.5	43.79	91.97	24.3	75.17	86.24	104.1
21.98	0.757	2.866	2.022	1.606	2.287	3.357
251.2	50.41	107.3	33.6	84.11	97.66	125.4
2501	143.5	654.9	351.9	420.3	551.1	782.7
542.2	6.802	40.34	45.49	17.85	24.53	45.19
4254	185.2	880.6	569.4	515.3	686.5	1084
0.1634	0.05263	0.09636	0.01406	0.08637	0.09587	0.1053
0.03113	0.001713	0.007041	0.003003	0.005169	0.00638	0.008146
0.2226	0.07117	0.1324	0.02283	0.1166	0.1313	0.146
0.3454	0.01938	0.1043	0.05281	0.06492	0.09263	0.1304
0.1354	0.002252	0.02548	0.01791	0.01308	0.02045	0.03245
1.058	0.02729	0.2543	0.1573	0.1472	0.2119	0.3391
0.4268	0	0.0888	0.07972	0.02956	0.06154	0.1307
0.396	0	0.03189	0.03019	0.01509	0.02589	0.04205
1.252	0	0.2722	0.2086	0.1145	0.2267	0.3829
0.2012	0	0.04892	0.0388	0.02031	0.0335	0.074
0.05279	0	0.0118	0.00617	0.007638	0.01093	0.01471
0.291	0	0.1146	0.06573	0.06493	0.09993	0.1614
0.304	0.106	0.1812	0.02741	0.1619	0.1792	0.1957
0.07895	0.007882	0.02054	0.008266	0.01516	0.01873	0.02348
0.6638	0.1565	0.2901	0.06187	0.2504	0.2822	0.3179
0.09744	0.04996	0.0628	0.00706	0.0577	0.06154	0.06612
0.02984	0.000895	0.003795	0.002646	0.002248	0.003187	0.004558
0.2075	0.05504	0.08395	0.01806	0.07146	0.08004	0.09208