Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic)

Luís Gustavo Aramys Almeida Matos

Inteligência Computacional

11 de dezembro de 2016

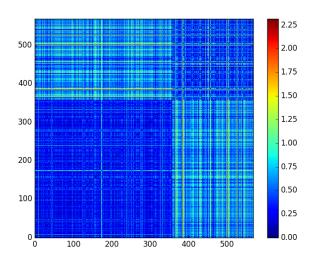
Dataset

- Exames para câncer de mama.
- Características do núcleo de células computadas a partir de imagens digitalizadas
- 30 variáveis de entrada
- 1 variável de saída (maligno ou benigno)
- 357 benigno e 212 maligno
- Raio, textura, perímetro, área, suavidade, compacidade, concavidade, pontos côncavos, simetria, dimensão fractal

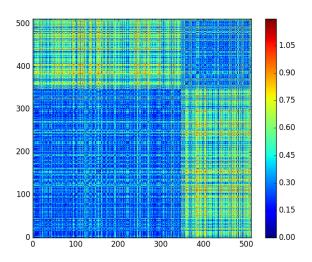
Problema'

- Problema de classificação
- Identificar se é benigno ou maligno (-1 ou 1).
- Aplicar e avaliar os modelos de classificação:
 - Classificador Bayesiano Simples
 - Classificador Bayesiano Quadrático
 - Regressão Logística
 - Perceptron
 - Perceptron Múltiplas Camadas
 - SVM

Distância Euclidiana



Distância Euclidiana



Histogramas

Smoothness

Histogramas

Texture

Tecnologia

Python

- SciPy
 - NumPy
 - matplotlib
 - pandas: Python Data Analysis Library
- scikit-learn: Machine Learning in Python

Matlab

Statistics and Machine Learning Toolbox

Metodologia

Para cada método de classificação foi feito:

- Validação cruzada de 10 ciclos
- Matriz de confusão (média de cada ciclo)
- Métricas de acurácia, precisão, recuperação.

Classificador Bayesiano Simples (Naive Bayes)

- Aplicação do teorema de Bayes
- Supõe que cada par de variáveis é independente

Theorem (Teorema de Bayes)

$$P(y|x_1...x_n) = \frac{P(y)P(x_1,...,x_n|y)}{P(x_1,...,x_n)}$$

Onde:

y é a variável de saída que identifica a classe

 $x = [x_1, \dots, x_n]$ é o vetor de entrada

Classificador Bayesiano (Naive Bayes) - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 93.67%
- AUC = 0.9266
- PRE(C1) = 0.94
- REC(C1) = 0.8868
- PRE(C2) = 0.9350
- REC(C2) = 0.9664

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2(Predita)$ |
|-------|---------------------------------|--------------------------------|
| C_1 | 18.80 | 2.40 |
| C_2 | 1.20 | 34.50 |

Tabela: Matriz de confusão

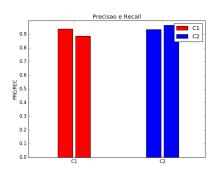


Figura: Precisão e Recall

Classificador Bayesiano Quadrático

- Um classificador com uma fronteira de decisão quadrática, gerado pela densidades condicionais dos dados e utilizando a regra de Bayes.
- A decisão é calculada pela função discriminante:

Função Discriminante

$$g_i(x(t)) = InP(C_i|x(t)) = InP(x(t)|C_i) + InP(C_i)$$

Classificador Bayesiano Quadrático - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 95.78%
- AUC = 0.9549
- PRE(C1) = 0.9434
- REC(C1) = 0.9434
- PRE(C2) = 0.9664
- REC(C2) = 0.9664

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2$ (Predita) |
|-------|---------------------------------|---------------------------------|
| C_1 | 20.00 | 1.20 |
| C_2 | 1.20 | 34.50 |

Tabela: Matriz de confusão

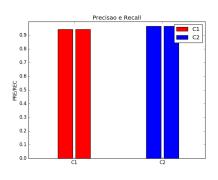


Figura: Precisão e Recall

Regressão Logística

- Na regressão logística, a saída do modelo é uma aproximação da probabilidade a posteriori.
- A função discriminante é calculada pela função sigmoide, ou função logística ou logit

Função Logística

$$g_i(x(t)|\theta_i)) = \frac{1}{1 + exp(\hat{x}(t)\theta_i)}$$

Onde:

$$\hat{x}(t) = [1, x(t)] \quad e \quad \theta_i = [\theta_{i0}, \theta_{i1}]^T$$

Regressão Logística - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 95.96%
- AUC = 0.9563
- PRE(C1) = 0.9479
- REC(C1) = 0.9434
- PRE(C2) = 0.9665
- REC(C2) = 0.9692

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2(Predita)$ |
|-------|---------------------------------|--------------------------------|
| C_1 | 20.00 | 1.20 |
| C_2 | 1.10 | 34.60 |

Tabela: Matriz de confusão

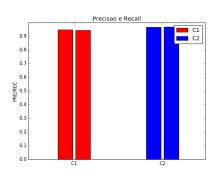


Figura: Precisão e Recall

Perceptron

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

McCulloch-Pitts

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

Onde:

u(t): valor de ativação

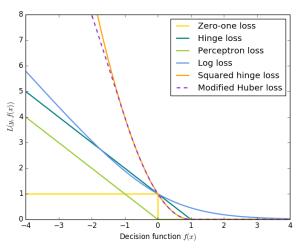
z(t): potencial de ativaçãos

h: função de ativação

 $x_i(t)$: entradas do neurônio

Perceptron

• Função custo: linear



Perceptron - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 96.13%
- AUC = 0.9615
- PRE(C1) = 0.9358
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9772
- REC(C2) = 0.9608

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2$ (Predita) |
|-------|---------------------------------|---------------------------------|
| C_1 | 20.40 | 0.80 |
| C_2 | 1.40 | 34.30 |

Tabela: Matriz de confusão

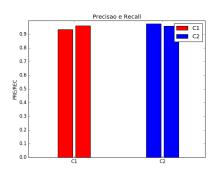
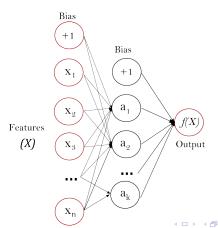


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas

- Camada de entrada que n\u00e3o realiza processamento (dimens\u00e3o do vetor de entrada)
- Camada de saída: vetor com as estimativas das variáveis indicadoras (dimensão vetor de saída)



Perceptron de Múltiplas Camadas

 A função custo a ser utilizada é a Entropia cruzada, ou função verossimilhança:

Entropia Cruzada

$$I(\theta) = -\sum_{t=1}^{N} \nu(t) log(\hat{\nu}) + (1 - \nu(t)) log(1 - \hat{\nu}(t))$$

A função de ativação nos neurônios das camadas intermediárias é:

Tangente hiperbólica

$$u(t) = \frac{1 - exp(-z(t))}{1 + exp(-z(t))}$$

- Método de ajuste dos parâmetros: Gradiente descendente estocástico
- Aprendizado através do Backpropagation



Perceptron de Múltiplas Camadas - Observações

- Capaz de aprender modelos não lineares
- Quando existem camadas escondidas, a função custo é não convexa
- Mais de um mínimo local
- Diferentes resultados a cada inicialização
- Sensível a escala das variáveis de entrada

Perceptron de Múltiplas Camadas - Observações

Padronização das variáveis de entrada

- MLP apresenta baixo desempenho sem padronização
- Média zero e desvio padrão 1
- A padronização é calculada para o conjunto de treinamento e as mesma transformação é aplicada para o conjunto de teste.

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Avaliação dos resultados para uma camada intermediária com 21 neurônios

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | \hat{C}_2 (Predita) | |
|-------|---------------------------------|-----------------------|--|
| C_1 | 20.20 | 1.00 | |
| C_2 | 0.40 | 35.30 | |

- ACC = 97.35%
- AUC = 97.08%
- PRE(C1) = 0.9806
- REC(C1) = 0.9528
- PRE(C2) = 0.9725
- REC(C2) = 0.9888

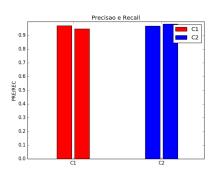


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Camada intermediária com 100 neurônios

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2(Predita)$ |
|-------|---------------------------------|--------------------------------|
| C_1 | 20.40 | 0.80 |
| C_2 | 0.30 | 35.40 |

- ACC = 98.07%
- AUC = 0.9769
- PRE(C1) = 0.9855
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9779
- REC(C2) = 0.9916

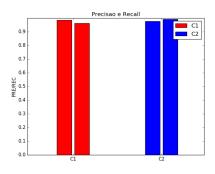


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Camadas intermediárias (10,10)

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | \hat{C}_2 (Predita) |
|-------|---------------------------------|-----------------------|
| C_1 | 20.30 | 0.90 |
| C_2 | 0.30 | 35.40 |

- ACC = 97.89%
- AUC = 0.9746
- PRE(C1) = 0.9854
- REC(C1) = 0.9575
- PRE(C2) = 0.9752
- REC(C2) = 0.9916

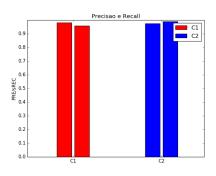


Figura: Precisão e Recall

Máquina de Vetor de Suporte

- Mais recomendado para vetores características de dimensões maiores
- Função de núcleo utilizada: RBF

Problema de ajuste de parametros

$$\min_{w,b,\zeta} \frac{1}{2} w^T w + C \sum_{i=1}^n \zeta_i$$
sujeito a $y_i(w^T \phi(x_i) + b) \ge 1 - \zeta_i$,
$$\zeta_i \ge 0, i = 1, ..., n$$

$$C = \frac{N}{\alpha}$$

w : direção ortogonal ao hiperplano da função discriminante

• Maximizar a margem de separação



Máquina de Vetor de Suporte - Resultados

Avaliação dos resultados

| | $\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita) | $\hat{\mathcal{C}}_2$ (Predita) |
|-------|---------------------------------|---------------------------------|
| C_1 | 20.40 | 0.80 |
| C_2 | 0.50 | 35.20 |

- ACC = 97.72%
- AUC = 0.9741
- PRE(C1) = 0.9761
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9778
- REC(C2) = 0.9860

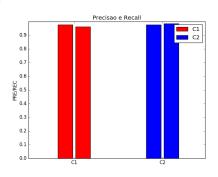


Figura: Precisão e Recall

Benchmark

| | ACC | AUC |
|---------------------|--------|--------|
| Baysiano Simples | 0,9367 | 0,9266 |
| Baysiano Quadrático | 0,9578 | 0,9549 |
| Regressão Logistica | 0,9596 | 0,9563 |
| Perceptron | 0,9613 | 0,9615 |
| MPL (21) | 0,9735 | 0,9708 |
| MPL(100) | 0,9807 | 0,9769 |
| MPL(10,10) | 0,9789 | 0,9746 |
| SVM | 0,9772 | 0,9741 |